



**ОПОВІДІ**  
НАЦІОНАЛЬНОЇ  
АКАДЕМІЇ НАУК  
УКРАЇНИ

2 • 2014

---

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. Локтев, 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, 2014

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 04.02.2014. Формат 84×108/16. Ум. друк. арк. 17,64. Обл.-вид. арк. 16.  
Тираж 204 прим. Зам. 3820. Ціна 30 грн.

---

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

# Зміст

---

## Математика

<i>Гордеский В. Д., Сазонова Е. С.</i> Об одном классе приближенных решений уравнения Больцмана с винтовыми модами .....	7
<i>Ковалев А. М., Горр Г. В., Неспирный В. Н.</i> Инвариантные соотношения неавтономных систем дифференциальных уравнений .....	13
<i>Коробов В. И., Бебия М. О.</i> Стабилизация одного класса нелинейных систем, неуправляемых по первому приближению .....	20
<i>Макаров В. Л., Романюк Н. М.</i> Нові властивості FD-методу при його застосуваннях до задач Штурма–Ліувілля .....	26
<i>Нестеренко В. В.</i> Характеризація властивості Гана .....	32

## Інформатика та кібернетика

<i>Белоусов А. А.</i> О дифференциальных играх с геометрическими и интегральными ограничениями .....	38
<i>Копець М. М.</i> Лінійно-квадратична задача оптимального керування процесом теплопровідності .....	45
<i>Литвин О. М., Литвин О. О., Ткаченко О. В., Грицай О. Л.</i> Відновлення функцій двох змінних із збереженням класу $C^r(\mathbb{R}^2)$ за допомогою їх слідів та слідів їх похідних до фіксованого порядку на заданій лінії .....	50

## Механіка

<i>Лила Д. М., Мартынюк А. А.</i> Потеря устойчивости вращающегося упругопластического плоского диска с убывающим радиусом .....	56
<i>Поляков В. Л.</i> К оценке эффекта упорядочения структуры несвязного грунта при неустановившейся напорной плоской фильтрации .....	63

## Фізика

<i>Бабич А. В.</i> Скрытая симметрия уравнений магнитной гидродинамики и инвариантные решения .....	72
<i>Мамуня Є. П., Левченко В. В., Воїтец Г., Лебедев Є. В.</i> Перколяційні ефекти провідності в полімерних нанокompозитах з бінарним наповнювачем .....	79
<i>Таран Є. Ю., Каліон В. А., Кондрат Р. Я.</i> Реологічна модель розведеного розчину недеформівних вільнопротічних ланцюгових макромолекул .....	85

## Матеріалознавство

<i>Бошницкая Н. В., Куцевская Н. Ф., Баглюк Г. А., Куровский В. Я., Гончарук Д. А.</i> Сравнительная характеристика нанопорошков на основе железа, полученных низкотемпературным синтезом из оксалатов и цитратов .....	92
---	----

## Науки про Землю

<i>Гордиенко В. В., Гордиенко И. В., Завгородняя О. В.</i> Тепловое поле юго-восточной части Днепровского бассейна Днепровско-Донецкой впадины .....	98
<i>Иванов В. А., Шокуров М. В., Дулов В. А., Чечина Е. В.</i> Прогноз погодных катастроф в Черноморском регионе .....	105

<i>Костинский А. С.</i> О принципах сплайн-экстраполяции геофизических данных .....	111
<i>Mostovoy V. S., Mostovyi S. V.</i> Estimation of the of seismic waves parameters .....	118

## **Хімія**

<i>Струтинська Н. Ю., Затовський І. В., Слободяник М. С., Малишенко А. І., Місчанчук Б. Г., Беда О. А.</i> Синтез та термічні перетворення складнозаміщених карбонатвмісних гідроксоапатитів .....	124
<i>Туров В. В., Тодор І. М., Лук'янова Н. Ю., Крупська Т. В., Угнівенко А. П., Чехун В. Ф.</i> Вплив трифтороцтової кислоти на кластеризацію води в частково дегідратованій тканині печінки щурів з карциномою Герена .....	129
<i>Шевченко В. В., Стрюцький А. В., Клименко Н. С., Яковлев Ю. В.</i> Протонная олигомерная ионная жидкость гиперразветвленного строения .....	136

## **Біологія**

<i>Бабута О. М., Линчак О. В., Рибальченко В. К.</i> Порівняння ефективності нової таргетної сполуки похідного малеїміду і цитостатика 5-фторурацилу при хемоіндукованому раку товстої кишки у щурів .....	142
<i>Болюх І. А., Діденко Г. В., Шпак Є. Г., Кузьменко О. П., Лісовенко Г. С., Потєбня Г. П.</i> Роль БТШ-пептидних комплексів у конструюванні протиопухлинних вакцин .....	146

## **Біохімія**

<i>Борова М. М., Науменко А. П., Пірко Я. В., Крутьдорова Т. А., Ємець А. І., Блюм Я. В.</i> Отримання квантових точок CdS з використанням гриба <i>Pleurotus ostreatus</i> .....	153
---	-----

## **Медицина**

<i>Чайковский И. А., Войтович И. Д.</i> Подходы к оценке степени зрелости клинических информационных технологий на примере технологий анализа электрической активности сердца .....	160
---	-----

# Contents

---

## Mathematics

- Gordevskyy V. D., Sazonova E. S.* About one class of approximate solutions of the Boltzmann equation with screw modes ..... 7
- Kovalev A. M., Gorr G. V., Nesporny V. N.* Invariant relations for nonautonomous systems of differential equations ..... 13
- Korobov V. I., Bebiya M. O.* Stabilization of some class of nonlinear systems that are uncontrollable in the first approximation ..... 20
- Makarov V. L., Romanyuk N. M.* New properties of the FD-method in its applications to the Sturm–Liouville problems ..... 26
- Nesterenko V. V.* A characterization of the Hahn property ..... 32

## Information Science and Cybernetics

- Belousov A. A.* On differential games with geometric and integral constraints ..... 38
- Kopets M. M.* A linear-quadratic problem of optimal control over the heat conductivity process ..... 45
- Lytvyn O. M., Lytvyn O. O., Tkachenko O. V., Gritsay O. L.* Recovery of the functions of two variables with preservation of the class  $C^r(R^2)$  with the help of their traces and the traces of their derivatives up to a fixed order on the given curve ..... 50

## Mechanics

- Lila D. M., Martynyuk A. A.* The loss of stability of a rotating resilient plastic plane disk with decreasing radius ..... 56
- Polyakov V. L.* On the estimation of the cohesiveless soil structure ordering at a non-steady head plane groundwater flow ..... 63

## Physics

- Babich A. V.* A hidden symmetry of the magnetohydrodynamical equations and invariant solutions ..... 72
- Mamunya Ye. P., Levchenko V. V., Boiteux G., Lebedev E. V.* Percolation effects of conductivity in polymer nanocomposites filled with a binary filler ..... 79
- Taran E. Yu., Kalion V. A., Kondrat R. Ya.* A rheological model of dilute suspension of undeformable free-drained chain macromolecules ..... 85

## Materials science

- Boshitskaya N. V., Kushchevskaya N. F., Baglyuk G. A., Kurovskii V. Ya., Goncharuk D. A.* Comparative characteristic of nanopowders on the basis of Fe obtained by the low-temperature synthesis from oxalates and citrates ..... 92

## Geosciences

- Gordienko V. V., Gordienko I. V., Zavgrodnaja O. V.* Heat field of the south-eastern part of the Dnieper basin of the Dnieper–Donets depression ..... 98
- Ivanov V. A., Shokurov M. V., Dulov V. A., Chechina E. V.* Forecast of weather disasters in the Black Sea region ..... 105

<i>Kostinsky A. S.</i> On the principles of a spline extrapolation concerning geophysical data .....	111
<i>Mostovoy V. S., Mostovyi S. V.</i> Estimation of the parameters of seismic waves .....	118

## Chemistry

<i>Strutynska N. Yu., Zatovsky I. V., Slobodyanik M. S., Malysenko A. I., Mischanchuk B. G., Byeda O. O.</i> Synthesis and thermal transformation of complexly substituted carbonated hydroapatites .....	124
<i>Turov V. V., Todor I. N., Lukianova N. Yu., Krupskaya T. V., Ugnienko A. P., Chekhun V. F.</i> Effect of trifluoroacetic acid on the water clustering in partially dehydrated rat liver with Guerin carcinoma .....	129
<i>Shevchenko V. V., Stryutskii A. V., Klimenko N. S., Yakovlev Yu. V.</i> Hyperbranched protic oligomeric ionic liquid .....	136

## Biology

<i>Babyta O. M., Lynchak O. V., Rybalchenko V. K.</i> Comparison of the effectivenesses of a new targeted compound maleimide derivative and cytostatic 5-fluorouracil in chemo-induced colon cancer in rats .....	142
<i>Boliukh I. A., Didenko G. V., Shpak E. G., Kusmenko A. P., Lisovenko G. S., Potebnya G. P.</i> Role of HSP-peptide complexes in the design of antitumor vaccines .....	146

## Biochemistry

<i>Borovaya M. N., Naumenko A. P., Pirko Ya. V., Krupodorova T. A., Yemets A. I., Blume Ya. B.</i> Production of CdS quantum dots with the use of fungus <i>Pleurotus ostreatus</i> ..	153
--	-----

## Medicine

<i>Chaikovsky I. A., Wojtowich I. D.</i> Approaches to the evaluation of the maturity degree of clinical information technologies by the example of technologies of analysis of the electrical activity of heart .....	160
--	-----



УДК 533.72

В. Д. Гордевский, Е. С. Сазонова

## Об одном классе приближенных решений уравнения Больцмана с винтовыми модами

(Представлено академиком НАН Украины Л. А. Пастуром)

*Построено новое явное приближенное решение нелинейного уравнения Больцмана для модели твердых сфер. Оно имеет вид континуальной суперпозиции локальных максвеллианов, описывающих винтообразные стационарные равновесные состояния газа. Получены некоторые предельные случаи, в которых это распределение минимизирует интегральную невязку между частями уравнения.*

Для описания взаимодействия между потоками газа из твердых сфер используется интегро-дифференциальное уравнение Больцмана [1–3], которое имеет вид

$$D(f) = Q(f, f), \quad (1)$$

$$D(f) = \frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x}, \quad (2)$$

$$Q(f, f) = \frac{d^2}{2} \int_{\mathbb{R}^3} dv_1 \int_{\Sigma} d\alpha |(v - v_1, \alpha)| [f(t, v'_1, x) f(t, v', x) - f(t, v_1, x) f(t, v, x)], \quad (3)$$

$$v' = v - \alpha(v - v_1, \alpha), \quad v'_1 = v + \alpha(v - v_1, \alpha), \quad (4)$$

где  $f(t, v, x)$  — искомая функция распределения молекул,  $\partial f / \partial x$  — ее пространственный градиент,  $t \in \mathbb{R}^1$  — время,  $x = (x^1, x^2, x^3) \in \mathbb{R}^3$  и  $v = (v^1, v^2, v^3) \in \mathbb{R}^3$  — координата и скорость молекулы,  $d > 0$  — ее диаметр,  $v, v_1, v'$  и  $v'_1$  — скорости молекул до и после столкновения,  $\alpha \in \Sigma, \Sigma$  — единичная сфера в  $\mathbb{R}^3$ .

Известными точными решениями уравнения (1)–(3) являются глобальные и локальные максвеллианы [1–3]. В связи с этим возникает вопрос о поиске явных приближенных решений уравнения Больцмана, удовлетворяющих ему лишь с произвольной степенью точности. В работах [4–8] получены различные такие решения.

© В. Д. Гордевский, Е. С. Сазонова, 2014

Далее, в работе [9] был предложен новый подход к поиску явных приближенных решений уравнения Больцмана, а именно континуальный вид функции распределения. При этом предполагается, что массовая скорость глобального максвеллиана принимает не фиксированные дискретные значения, а становится произвольным параметром, принимающим любые значения из  $\mathbb{R}^3$ .

Целью данной работы является изучение поведения континуального распределения, в которое входят локальные максвеллианы частного вида, описывающие винтообразные стационарные равновесные состояния газа (кратко винты) [4, 5, 10]. Каждый такой максвеллиан имеет вид

$$M(v, u, x) = \rho_0 e^{\beta \omega^2 r^2} \left( \frac{\beta}{\pi} \right)^{3/2} e^{-\beta(v-u-[\omega \times x])^2}. \quad (5)$$

С точки зрения физического смысла распределение (5) описывает ситуацию, когда газ имеет обратную температуру  $\beta = 1/2T$  и вращается как целое с угловой скоростью  $\omega \in \mathbb{R}^3$  вокруг оси, проходящей через точку  $x_0 \in \mathbb{R}^3$  ( $x_0 = [\omega \times \bar{v}]/\omega^2$ ),  $r^2 = [\omega \times (x - x_0)]^2/\omega^2$  — квадрат расстояния до оси вращения, а плотность газа  $\rho = \rho_0 e^{\beta \omega^2 r^2}$  ( $\rho_0$  — плотность на оси вращения, т. е.  $r = 0$ ),  $u \in \mathbb{R}^3$  — произвольный параметр (линейная массовая скорость в точках  $x$ , для которых  $x \parallel \omega$ ), а  $u + [\omega \times x]$  — массовая скорость в произвольной точке  $x$ . Также распределение (5) помимо вращательного задает и поступательное движение вдоль оси вращения с линейной скоростью  $([\omega, \bar{v}]/\omega^2)\omega$ , т. е. действительно описывает винтообразное движение газа в целом, причем это распределение стационарно (не зависит от  $t$ ), но неоднородно.

Будем рассматривать континуальное распределение следующего вида:

$$f = \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(t, x, u) M(v, u, x) du. \quad (6)$$

Предполагается, что коэффициентная функция  $\varphi(t, x, u)$  является неотрицательной и принадлежащей  $C^1(\mathbb{R}^7)$ . Требуется найти такие функции  $\varphi(t, x, u)$  и такое поведение всех имеющихся параметров, чтобы интегральная невязка [11]

$$\Delta_1 = \int_{\mathbb{R}^1} dt \int_{\mathbb{R}^3} dx \int_{\mathbb{R}^3} |D(f) - Q(f, f)| dv \quad (7)$$

стремилась при этом к нулю.

Сначала несколько преобразуем правую часть (10). Прежде всего вычислим и оценим интеграл по переменной  $v$ , подставляя в (1)–(3) распределение (5), (6) и учитывая, что  $D(M) = Q(M, M) = 0$ , введем обозначение

$$\begin{aligned} \widetilde{M} &= \widetilde{M}(v, u, x) = \rho \left( \frac{\beta}{\pi} \right)^{3/2} e^{-\beta(v-\tilde{u})^2}, \\ \tilde{u} &= \tilde{u}(x) = u + [\omega \times x]. \end{aligned} \quad (8)$$



Тогда, подставив (6) в выражение (7) и произведя, как обычно, разбиение интеграла столкновений  $Q$  на “прибыточную” и “затратную” части  $G$  и  $L$  [1], получим следующую оценку сверху:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |D(f) - Q(f, f)| dv \leq \int_{\mathbb{R}^6} \left| \frac{\partial \varphi}{\partial t} + v \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right| e^{\beta \omega^2 r^2} \widetilde{M} dudv + e^{2\beta \omega^2 r^2} \int_{\mathbb{R}^6} \varphi(t, x, u_1) \varphi(t, x, u_2) \int_{\mathbb{R}^3} [\widetilde{M}_1 L(\widetilde{M}_2) + \widetilde{M}_2 L(\widetilde{M}_1)] du_1 du_2 dv. \quad (9)$$

Из (8) видно, что для корректной определенности невязки (7) на коэффициентные функции  $\varphi$  следует наложить новые условия быстрого убывания по пространственной переменной  $x$ . Поэтому введем новое обозначение

$$\varphi(t, x, u) = \psi(t, x, u) e^{-\beta \omega^2 r^2}, \quad (10)$$

где функции гладкие и неотрицательные. Тогда оценка (9) с учетом (10) и (7) приобретает вид

$$\int_{\mathbb{R}^3} |D(f) - Q(f, f)| dv \leq \int_{\mathbb{R}^6} \left| \frac{\partial \psi}{\partial t} + v \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} - 2\beta \psi [ [\omega \times (x - x_0)] \times \omega ] \right) \right| \widetilde{M} dudv + \int_{\mathbb{R}^6} \psi(t, x, u_1) \psi(t, x, u_2) \int_{\mathbb{R}^3} [\widetilde{M}_1 L(\widetilde{M}_2) + \widetilde{M}_2 L(\widetilde{M}_1)] du_1 du_2 dv. \quad (11)$$

**Теорема.** Пусть выполнены условия (5), (8) и (10), а также

$$\omega = \frac{\omega_0 s}{\beta^k}, \quad (12)$$

где  $s > 0$  — любая постоянная величина,  $\omega_0$  — произвольный фиксированный вектор (остальные параметры также произвольны и фиксированы). Тогда если следующие функции принадлежат пространству  $L_1(\mathbb{R}^7)$

$$\psi, \quad |u|\psi, \quad \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad u \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad |[\omega_0 \times x]|\psi, \quad \left( [\omega_0 \times x], \frac{\partial \psi}{\partial x} \right), \quad (13)$$

то определенная в соответствии с (7) величина  $\Delta_1$  имеет смысл и существует такое  $\Delta'_1$ , что  $\Delta_1 \leq \Delta'_1$ . Причем если  $1/2 < k \leq 1$ , то существует конечный предел

$$L = \lim_{\beta \rightarrow +\infty} \Delta'_1 = \int_{\mathbb{R}^1} dt \int_{\mathbb{R}^3} dx \left[ \rho \int_{\mathbb{R}^3} \left| \frac{\partial \psi}{\partial t} + u \frac{\partial \psi}{\partial x} \right| du + 2\pi^3 d^2 \rho^2 \int_{\mathbb{R}^6} \psi(t, x, u_1) \psi(t, x, u_2) |u_1 - u_2| du_1 du_2 \right]. \quad (14)$$

**Доказательство.** Существование интегральной невязки  $\Delta_1$  вытекает из (7), (11) и (13), причем имеет место следующее неравенство:

$$\begin{aligned} \Delta_1 \leq \Delta'_1 = & \int_{R^1} dt \int_{R^3} dx \left[ \int_{\mathbb{R}^6} \left| \frac{\partial \psi}{\partial t} + v \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} - 2\beta \psi [ [\omega \times (x - x_0)] \times \omega ] \right) \right| \widetilde{M} dv du + \right. \\ & \left. + \int_{\mathbb{R}^6} \psi(t, x, u_1) \psi(t, x, u_2) \int_{\mathbb{R}^3} [\widetilde{M}_1 L(\widetilde{M}_2) + \widetilde{M}_2 L(\widetilde{M}_1)] dv du_1 du_2 \right]. \end{aligned} \quad (15)$$

В (15) была также выполнена перестановка порядка интегрирований, законность которой легко обосновывается с учетом условий теоремы.

Введем замену переменных:

$$\sqrt{\beta}(v - \tilde{u}) = w; \quad v = \frac{w}{\sqrt{\beta}} + \tilde{u} = \frac{w}{\sqrt{\beta}} + u + [\omega \times x].$$

Тогда

$$\begin{aligned} \Delta'_1 = & \int_{R^1} dt \int_{R^3} dx \left[ \rho \pi^{-3/2} \int_{\mathbb{R}^6} \left| \frac{\partial \psi}{\partial t} + \left( \frac{w}{\sqrt{\beta}} + u + [\omega \times x] \right) \times \right. \right. \\ & \left. \left. \times \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} - 2\beta \psi [ [\omega \times (x - x_0)] \times \omega ] \right) \right| e^{-w^2} dw du \right] + \\ & \left. + \int_{R^1} dt \int_{R^3} dx \left[ \int_{\mathbb{R}^6} \psi(t, x, u_1) \psi(t, x, u_2) \int_{\mathbb{R}^3} [\widetilde{M}_1 L(\widetilde{M}_2) + \widetilde{M}_2 L(\widetilde{M}_1)] dw du_1 du_2 \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

Произведя здесь еще одну замену переменных:

$$\sqrt{\beta}(v_1 - \tilde{u}_2) = z; \quad v_1 = \frac{z}{\sqrt{\beta}} + \tilde{u}_2 = \frac{z}{\sqrt{\beta}} + u_2 + [\omega \times x],$$

получим

$$M_1 L(M_2) = M \left( \frac{w}{\sqrt{\beta}} + u_1, u_1 \right) \frac{d^2 \rho}{\sqrt{\pi}} \int_{\mathbb{R}^3} dz e^{-z^2} \left| \frac{w}{\sqrt{\beta}} + u_1 - \frac{z}{\sqrt{\beta}} - u_2 \right|.$$

Аналогично

$$M_2 L(M_1) = M \left( \frac{w}{\sqrt{\beta}} + u_2, u_2 \right) \frac{d^2 \rho}{\sqrt{\pi}} \int_{\mathbb{R}^3} dz e^{-z^2} \left| \frac{w}{\sqrt{\beta}} + u_2 - \frac{w}{\sqrt{\beta}} - u_1 \right|.$$

Для упрощения выражения (16) введем некоторые новые обозначения:

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{\beta}}, \quad (17)$$

$$A(w, u, t, x) = \rho \frac{d^2}{\sqrt{\pi}} \int_{\mathbb{R}^3} dz e^{-z^2} |w\gamma + (u_1 - u_2) - z\gamma|, \quad (18)$$

$$B(w, u, t, x) = \frac{\partial \psi}{\partial x} (w\gamma + u + \gamma^2 s[\omega_0 \times x]) + 2\psi\gamma s\{(w, [\omega_0 \times u]) - s\gamma^2[\omega_0 \times w][\omega_0 \times x]\}. \quad (19)$$

С учетом (18) и (19) перепишем выражение (16) в следующем виде:

$$\Delta'_1 = \int_{R^1} dt \int_{R^3} dx \left[ \rho\pi^{-3/2} \int_{R^3} \left| \frac{\partial \psi}{\partial x} + B(w, u, t, x) \right| e^{-w^2} dw du + \right. \\ \left. + 2\rho\pi^{-3/2} \int_{R^6} \psi(t, x, u_1)\psi(t, x, u_2) \int_{R^3} A(w, u_1, u_2, t, x) e^{-w^2} dw du_1 du_2 \right]. \quad (20)$$

Подынтегральные функции двух слагаемых выражения  $\Delta'_1$  непрерывны по переменным  $t, x, u$  и  $\beta$  благодаря условиям теоремы. Следовательно, интеграл (20) сходится равномерно относительно переменной  $\gamma$  на любом компакте благодаря условию (13) и наличию множителя  $e^{-w^2}$ . Значит, вся величина  $\Delta'_1$  непрерывна по  $\gamma$  и мы можем перейти к пределу при  $\gamma \rightarrow 0$  ( $\beta \rightarrow +\infty$ ). После интегрирования по переменным  $z$  и  $w$  приходим к (14). Теорема доказана.

Далее, опираясь на полученное выражение для предела при  $\beta \rightarrow +\infty$ , найдем достаточное условие стремления невязки  $\Delta_1$  к нулю.

**Следствие.** Пусть выполнены все предположения теоремы. Тогда соотношение

$$\Delta_1 \rightarrow 0 \quad (21)$$

справедливо, если функция  $\psi$ , определенная в выражении (10), такова:

$$\psi(t, x, u, \rho) = g(t, x) \left( \frac{P}{\pi} \right)^{3/2} e^{-P(u-u_0)^2}, \quad (22)$$

где функция  $g(t, x)$  имеет вид финитного плато [8],  $u_0 \in \mathbb{R}^3$  — произвольный фиксированный вектор, а  $P \rightarrow +\infty$ .

**Доказательство.** Воспользуемся предельным выражением (14) и подставим в него (22). Подынтегральное выражение первого слагаемого стремится к нулю (как показано в [8]). Благодаря условиям следствия интеграл второго слагаемого сходится и стремится к нулю. Следствие доказано.

1. Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана. — Москва: Мир, 1978. — 495 с.
2. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. — Москва: Наука, 1967. — 440 с.
3. Карлеман Т. Математические задачи кинетической теории газов. — Москва: Изд-во иностр. лит., 1960. — 118 с.
4. Гордевский В. Д. Двухпотокное распределение с винтовыми модами // Теор. и мат. физика. — 2001. — **126**, № 2. — С. 283–300.
5. Гордевский В. Д. Винтовые потоки с ускорением и уплотнением для модели твердых сфер // Там же. — 2009. — **161**, № 2. — С. 278–286.
6. Gordevskyy V. D. Transitional regime between vortical states of a gas // Nonlinear Analysis: Theory, Methods and Applications (NA 3752). — 2003. — **53**, No 3–4. — P. 481–494.
7. Гордевский В. Д. Вихри в газе из твердых сфер // Теор. и мат. физика. — 2003. — **135**, № 2. — С. 303–314.
8. Gordevskyy V. D. Trimodal approximate solution of the non-linear Boltzmann equation // Math. Meth. Appl. Sci. — 1998. — **21**. — P. 1479–1494.

9. Гордевский В. Д., Сазонова Е. С. Континуальный аналог бимодальных распределений // Теор. и мат. физика. – 2012. – **171**, № 3. – С. 483–492.
10. Gordevskyy V. D., Sazonova E. S. Asymmetrical bimodal distributions with screw modes // Math. Phys., Anal., Geom. – 2011. – **7**, No 3. – P. 212–224.
11. Гордевский В. Д. Приближенное двухпотокное решение уравнения Больцмана // Теор. и мат. физика. – 1998. – **114**, № 1. – С. 126–136.

Харьковский национальный университет  
им. В. Н. Каразина

Поступило в редакцию 09.08.2013

**В. Д. Гордевський, О. С. Сазонова**

### **Про один клас наближених розв'язків рівняння Больцмана з гвинтовими модами**

*Побудовано новий явний наближений розв'язок нелінійного рівняння Больцмана для моделі твердих куль. Він має вид континуальної суперпозиції локальних максвеліанів, що описують гвинтоподібні стаціонарні рівноважні стани газу. Отримано деякі граничні випадки, в яких цей розподіл мінімізує інтегральний відхил між частинами рівняння.*

**V. D. Gordevskyy, E. S. Sazonova**

### **About one class of approximate solutions of the Boltzmann equation with screw modes**

*A new evident approximate solution of the nonlinear Boltzmann equation for the model of hard spheres is built. It has form of a continual superposition of local Maxwellians, describing the screw-shaped stationary equilibrium states of a gas. Some sufficient cases, in which this distribution minimizes the integral remainder between the sides of the equation, are obtained.*

## Инвариантные соотношения неавтономных систем дифференциальных уравнений

*Обобщен метод инвариантных соотношений Пуанкаре, Леви-Чивиты, Харламова на системы дифференциальных уравнений с правыми частями, зависящими от времени. В качестве примера рассмотрены уравнения движения неавтономного тяжелого гиристора, найдены условия существования равномерных вращений и построены инвариантные многообразия.*

Метод инвариантных соотношений (ИС) системы обыкновенных дифференциальных уравнений, развитый в работах А. Пуанкаре [1], Т. Леви-Чивиты [2], П. В. Харламова [3], получил широкое применение в задачах динамики твердого тела, теории устойчивости движения механических систем, задачах управления, стабилизации и синхронизации динамических систем. С помощью этого метода найдены многочисленные классы новых точных решений уравнений Эйлера–Пуассона и их обобщений [4–6], разработана теория вложения инвариантных многообразий в семейство интегральных многообразий [7], исследованы свойства управляемости механических систем [8]. Важность теории ИС прослеживается и в задачах устойчивости решений обыкновенных дифференциальных уравнений [9, 10].

Метод ИС [3] был изначально предложен и обоснован для систем, правые части которых явно не зависят от времени. В данной работе исследованы ИС для неавтономных систем дифференциальных уравнений. Обобщение метода ИС дает возможность расширить класс рассматриваемых систем и позволяет распространить многие результаты, полученные в динамике твердого тела и теории устойчивости, на нестационарный случай.

**1. Постановка задачи.** Рассмотрим систему обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$\dot{x}_i = \frac{dx_i}{dt} = X_i(x_1, \dots, x_n, t), \quad i = \overline{1, n}, \quad (1)$$

где  $t$  — независимая переменная,  $x_1, \dots, x_n$  — неизвестные функции этой переменной, а  $X_i$  — функции от  $n+1$  переменных, заданные на некотором открытом множестве  $U$  пространства размерности  $n+1$ , в котором координатами являются компоненты вектора  $(x_1, \dots, x_n, t)$ . Будем предполагать, что функции  $X_i(x_1, \dots, x_n, t)$ ,  $i = \overline{1, n}$ , имеют непрерывные частные производные любого порядка.

При рассмотрении неавтономной системы (1) целесообразно преобразовать ее к автономному виду. Следуя [11], положим  $t = x_{n+1}$ . Тогда уравнения (1) можно записать в виде

$$\dot{u}_i = Y_i(u_1, \dots, u_{n+1}), \quad i = \overline{1, n+1}, \quad (2)$$

где  $Y_i \equiv X_i$ ,  $i = \overline{1, n}$ ,  $Y_{n+1} \equiv 1$ . Решению уравнений (1) с начальными условиями  $x_i(t_0) = x_i^{(0)}$  будет соответствовать решение уравнений (2) с начальными условиями

$$u_i(0) = x_i^{(0)}, \quad i = \overline{1, n}, \quad u_{n+1}(0) = t_0. \quad (3)$$

Это соответствие определяется зависимостью  $x_i(t) = u_i(t - t_0)$ ,  $i = \overline{1, n}$ .





Пусть поставлена задача о нахождении уравнений, определяющих множество  $M$  при заданном ИС (4). Согласно доказанной выше теореме, необходимо построить цепочку производных (6). Затем нужно поэтапно провести исследование зависимости входящих в (7) уравнений. То есть на первом этапе следует провести исследование зависимости производной  $f^{(2)}(u_1, \dots, u_{n+1})$  от соотношения (4). Если будут найдены условия, при выполнении которых

$$f^{(2)}(u_1, \dots, u_{n+1}) \Big|_{f^{(1)}(u_1, \dots, u_{n+1})=0} \equiv 0,$$

то множество  $G$  является инвариантным.

Очевидно, что при дальнейшем изучении системы (7) необходимо рассмотреть случаи

$$f^{(l)}(u_1, \dots, u_{n+1}) \Big|_{f^{(1)}(u_1, \dots, u_{n+1})=0, \dots, f^{(l-1)}(u_1, \dots, u_{n+1})=0} \equiv 0. \quad (11)$$

В формуле (11) предусмотрены все варианты исследования системы (7). При выполнении (11) получим систему уравнений, которая задает инвариантное множество  $M$ .

**3. Равномерные вращения тяжелого гиростата.** Применим полученные выше результаты в задаче об условиях существования равномерных вращений гиростата с переменным гиростатическим моментом под действием силы тяжести:

$$A\dot{\bar{\omega}} = -\bar{L} + \bar{\lambda} \times \bar{\omega} + A\bar{\omega} \times \bar{\omega} + \bar{s} \times \bar{\nu}, \quad \dot{\bar{\nu}} = \bar{\nu} \times \bar{\omega}, \quad \dot{\bar{\lambda}} = \bar{L}. \quad (12)$$

Здесь  $\bar{\omega} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3)$  — угловая скорость тела-носителя;  $\bar{\nu} = (\nu_1, \nu_2, \nu_3)$  — единичный вектор, указывающий направление силы тяжести;  $\bar{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$  — гиростатический момент;  $\bar{L}$  — вектор-функция, характеризующая взаимодействие тела-носителя и носимых тел;  $A$  — тензор инерции;  $\bar{s} = (s_1, s_2, s_3)$  — вектор, сонаправленный с вектором  $OC$ , где  $O$  — неподвижная точка,  $C$  — центр тяжести гиростата.

Уравнения (12) имеют два интеграла

$$\bar{\nu} \cdot \bar{\nu} = 1, \quad (A\bar{\omega} + \bar{\lambda}) \cdot \bar{\nu} = k, \quad (13)$$

где  $k$  — произвольная постоянная.

Пусть тело-носитель совершает равномерное вращение относительно наклонной оси, которая характеризуется вектором  $\bar{\gamma}_*$  в неподвижном пространстве. В силу известного свойства этот вектор будет неизменным и в теле-носителе, т. е.

$$\bar{\omega} = \omega_0 \bar{a}, \quad (14)$$

где  $\bar{a}$  — единичный вектор, неизменный в теле-носителе,  $\omega_0$  — скорость равномерного вращения. Рассмотрим вначале уравнение Пуассона из (12). Подставим в него выражение (14):

$$\dot{\bar{\nu}} = \omega_0 (\bar{\nu} \times \bar{a}). \quad (15)$$

Направим третью ось подвижной системы координат по вектору  $\bar{a} = (0, 0, 1)$ , а первую ось — по направлению  $\bar{\nu}(0) \times \bar{a} = (a'_0, 0, 0)$ . Тогда из уравнения (15) и геометрического интеграла из (13) вытекает [6]

$$\nu_1 = a'_0 \sin \omega_0 t, \quad \nu_2 = a'_0 \cos \omega_0 t, \quad \nu_3 = a_0, \quad (16)$$



где  $a_0 = \cos \theta$ ,  $a'_0 = \sin \theta$ , а  $\theta = (\overline{a}, \overline{v})$ . Обозначим через  $\overline{v} = \overline{v}(t)$  вектор с координатами (16) и подставим (14) и  $\overline{L} = \dot{\overline{\lambda}}$  в первое уравнение системы (12):

$$\dot{\overline{\lambda}}(t) = \omega_0(\overline{\lambda}(t) \times \overline{a}) + \omega_0^2(A\overline{a} \times \overline{a}) + \overline{s} \times \overline{v}(t). \quad (17)$$

Таким образом, исследование существования равномерных вращений в задаче (12) сводится к вопросу о существовании решения неавтономного уравнения (17).

Изучение уравнения (17) будем проводить при условии

$$\overline{\lambda}(t) = \lambda_1(t)\overline{\alpha} + \lambda_2(t)\overline{\beta}, \quad (18)$$

где  $\overline{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ ,  $\overline{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \beta_3)$ ,  $|\overline{\alpha}| = |\overline{\beta}| = 1$ ,  $\overline{\alpha} \cdot \overline{\beta} = 0$ . Подставим выражение (18) в уравнение (17):

$$\dot{\lambda}_1(t)\overline{\alpha} + \dot{\lambda}_2(t)\overline{\beta} = \omega_0\lambda_1(t)(\overline{\alpha} \times \overline{a}) + \omega_0\lambda_2(t)(\overline{\beta} \times \overline{a}) + \omega_0^2(A\overline{a} \times \overline{a}) + \overline{s} \times \overline{v}(t). \quad (19)$$

Структура уравнения (19) показывает, что целесообразно рассмотреть равенства, которые вытекают в результате скалярного умножения левой и правой частей (19) на векторы  $\overline{\alpha}$ ,  $\overline{\beta}$ ,  $\overline{\alpha} \times \overline{\beta}$ :

$$\dot{\lambda}_1(t) = \omega_0\gamma_3\lambda_2(t) + \mu_0 + \mu_3 \sin \omega_0 t + \mu_4 \cos \omega_0 t, \quad (20)$$

$$\dot{\lambda}_2(t) = -\omega_0\gamma_3\lambda_1(t) + \varepsilon_0 + \varepsilon_3 \sin \omega_0 t + \varepsilon_4 \cos \omega_0 t, \quad (21)$$

$$f(\lambda_1, \lambda_2, t) = \omega_0(\beta_3\lambda_1(t) - \alpha_3\lambda_2(t)) + \sigma_0 + \sigma_3 \sin \omega_0 t + \sigma_4 \cos \omega_0 t = 0, \quad (22)$$

где

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \alpha_2\beta_3 - \alpha_3\beta_2, & \gamma_2 &= \alpha_3\beta_1 - \alpha_1\beta_3, & \gamma_3 &= \alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1, \\ B_1 &= A_{13}\omega_0^2 + a_0s_1, & B_2 &= A_{23}\omega_0^2 + a_0s_2, \\ \mu_3 &= a'_0(\alpha_2s_3 - \alpha_3s_2), & \varepsilon_3 &= a'_0(\beta_2s_3 - \beta_3s_2), & \sigma_3 &= a'_0(\gamma_2s_3 - \gamma_3s_2), \\ \mu_4 &= a'_0(\alpha_3s_1 - \alpha_1s_3), & \varepsilon_4 &= a'_0(\beta_3s_1 - \beta_1s_3), & \sigma_4 &= a'_0(\gamma_3s_1 - \gamma_1s_3), \\ \mu_0 &= \alpha_1B_2 - \alpha_2B_1, & \varepsilon_0 &= \beta_1B_2 - \beta_2B_1, & \sigma_0 &= \gamma_1B_2 - \gamma_2B_1. \end{aligned} \quad (23)$$

Таким образом, задача об исследовании условий существования равномерных вращений гиростата сводится к анализу условий, при которых соотношение (22) будет инвариантным для системы уравнений (20), (21).

Применим указанный выше метод ИС для неавтономных дифференциальных уравнений. Вычислим первую и вторую производные от ИС (22) в силу уравнений (20), (21) и приравняем их нулю:

$$\dot{f}(\lambda_1, \lambda_2, t) = \omega_0[\gamma_3\omega_0(\alpha_3\lambda_1(t) + \beta_3\lambda_2(t)) + p_0 + p_3 \sin \omega_0 t + p_4 \cos \omega_0 t] = 0, \quad (24)$$

$$\ddot{f}(\lambda_1, \lambda_2, t) = \omega_0^2[\gamma_3^2\omega_0(\alpha_3\lambda_2(t) - \beta_3\lambda_1(t)) + P_0 + P_3 \sin \omega_0 t + P_4 \cos \omega_0 t] = 0. \quad (25)$$

Здесь с учетом (23) введены обозначения

$$\begin{aligned} p_0 &= \beta_3\mu_0 - \alpha_3\varepsilon_0, & p_3 &= \beta_3\mu_3 - \alpha_3\varepsilon_3 - \sigma_4, & p_4 &= \beta_3\mu_4 - \alpha_3\varepsilon_4 + \sigma_3, \\ P_0 &= \gamma_3(\alpha_3\mu_0 + \beta_3\varepsilon_0), & P_3 &= \gamma_3(\alpha_3\mu_3 + \beta_3\varepsilon_3) - p_4, & P_4 &= \gamma_3(\alpha_3\mu_4 + \beta_3\varepsilon_4) + p_3. \end{aligned} \quad (26)$$

Исследование цепочки производных (22), (24), (25) будем проводить в следующих случаях:

$$1) \alpha_3 = \beta_3 = 0, \quad \gamma_3 = \pm 1; \quad 2) \gamma_3 = 0, \quad \alpha_3^2 + \beta_3^2 = 1; \quad 3) \gamma_3 \neq 0, \quad \alpha_3^2 + \beta_3^2 \neq 0.$$

В случае 1 векторы  $\bar{\alpha}$  и  $\bar{\beta}$  ортогональны вектору  $\bar{a}$  и, следовательно, гиристатический момент расположен в плоскости, перпендикулярной оси вращения. На основании обозначений (23) из уравнения (22) получим

$$s_1 = s_2 = 0. \quad (27)$$

Все уравнения (22), (24) и (25) становятся тогда тождествами. Это означает, что любое решение уравнений (20), (21), имеющее при указанных условиях вид

$$\begin{aligned} \lambda_1(t) &= -\omega_0(\alpha_1 A_{23} + \alpha_2 A_{13}) + (C_1 - s_3 a'_0 \alpha_1 t) \cos \omega_0 t + (C_2 + s_3 a'_0 \alpha_2 t) \sin \omega_0 t, \\ \lambda_2(t) &= -\omega_0(\beta_1 A_{23} + \beta_2 A_{13}) + (\gamma_3 C_1 - s_3 a'_0 \beta_1 t) \cos \omega_0 t + (-\gamma_3 C_1 + s_3 a'_0 \beta_2 t) \sin \omega_0 t, \end{aligned} \quad (28)$$

обеспечивает режим равномерных вращений. Условие (27) означает, что центр тяжести гиристата лежит на оси вращения. Поскольку в реальных конструкциях значения  $\lambda_1(t)$  и  $\lambda_2(t)$  из (28) ограничены, то необходимо положить

$$s_3 = 0. \quad (29)$$

Механический смысл условий (27) и (29) заключается в том, что центр тяжести находится в точке закрепления гиристата.

Когда имеет место случай 2, векторы  $\bar{a}$ ,  $\bar{\alpha}$ ,  $\bar{\beta}$  лежат в одной плоскости. Уравнение (24) при  $\gamma_3 = 0$  не зависит от  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$ , а следовательно, должно быть тождеством по  $t$ . Это возможно лишь при выполнении (29) и еще одного дополнительного условия

$$\gamma_2(A_{23}\omega_0^2 + a_0 s_2) + \gamma_1(A_{13}\omega_0^2 + a_0 s_1) = 0. \quad (30)$$

Нетрудно убедиться в том, что при выполнении (30) свободные члены  $\mu_0$ ,  $\varepsilon_0$  в правых частях уравнений (20), (21) становятся равными нулю. Интегрирование этих уравнений с учетом ИС (22) приводит к следующему решению:

$$\begin{aligned} \lambda_1(t) &= \omega_0^{-1} \{ \alpha_3 [a'_0 (s_1 \sin \omega_0 t + s_2 \cos \omega_0 t) + C] + \alpha_1 B_2 + \alpha_2 B_1 \}, \\ \lambda_2(t) &= \omega_0^{-1} \{ \beta_3 [a'_0 (s_1 \sin \omega_0 t + s_2 \cos \omega_0 t) + C] + \beta_1 B_2 + \beta_2 B_1 \}, \end{aligned} \quad (31)$$

где  $C$  — произвольная постоянная.

Рассмотрим общий случай, т. е. случай 3. Линейно комбинируя уравнения (22) и (25), получим соотношение, которое не зависит от  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ . Чтобы это соотношение было тождеством по  $t$ , необходимо потребовать выполнение условия (29). В этом случае функция  $\ddot{f}$  станет зависимой от  $f$ , а система функций  $\{f, \dot{f}\}$  — независимой. Инвариантное многообразие тогда задается уравнениями (22) и (24) и содержит единственное решение:

$$\begin{aligned} \lambda_1(t) &= \Delta^{-1} [(\alpha_3 p_0 + \gamma_3 \beta_3 \sigma_0) + (\alpha_3 p_3 + \gamma_3 \beta_3 \sigma_3) \sin \omega_0 t + (\alpha_3 p_4 + \gamma_3 \beta_3 \sigma_4) \cos \omega_0 t], \\ \lambda_2(t) &= \Delta^{-1} [(\beta_3 p_0 - \gamma_3 \alpha_3 \sigma_0) + (\beta_3 p_3 - \gamma_3 \alpha_3 \sigma_3) \sin \omega_0 t + (\beta_3 p_4 - \gamma_3 \alpha_3 \sigma_4) \cos \omega_0 t], \end{aligned} \quad (32)$$

где  $\Delta = \omega_0 \gamma_3 (\alpha_3^2 + \beta_3^2)$ . Функции (32) определяют гиростатический момент вида (18), который обеспечивает режим равномерного вращения гиростата. Согласно (29) такое решение имеет место, если барицентрическая ось ортогональна оси равномерного вращения.

Таким образом, установлены необходимые условия существования у системы неавтономных дифференциальных уравнений инвариантного соотношения. Доказана теорема, которая является обобщением теоремы Харламова, полученной им для случая автономных дифференциальных уравнений. Найденные результаты применены при исследовании равномерных движений тяжелого гиростата с переменным гиростатическим моментом.

1. Пуанкаре А. Избранные труды. Т. 1. Новые методы небесной механики. – Москва: Наука, 1971. – 771 с.
2. Леви-Чивита Т., Амальди У. Курс теоретической механики. В 2-х т. Т. 2, ч. 2. – Москва: Изд-во иностр. лит., 1951. – 555 с.
3. Харламов П. В. Об инвариантных соотношениях системы дифференциальных уравнений // Механика твердого тела. – 1974. – Вып. 6. – С. 15–24.
4. Гашененко И. Н., Горр Г. В., Ковалев А. М. Классические задачи динамики твердого тела. – Киев: Наук. думка, 2012. – 401 с.
5. Горр Г. В., Кудряшова Л. В., Степанова Л. А. Классические задачи динамики твердого тела. – Киев: Наук. думка, 1978. – 296 с.
6. Горр Г. В., Мазнев А. В. Динамика гиростата, имеющего неподвижную точку. – Донецк: ДонНУ, 2010. – 364 с.
7. Ковалев А. М. Вложение инвариантных многообразий в семейство интегральных многообразий и анализ решения Гесса // Механика твердого тела. – 2002. – Вып. 32. – С. 16–31.
8. Ковалев А. М. Нелинейные задачи управления и наблюдения в теории динамических систем. – Киев: Наук. думка, 1980. – 174 с.
9. Ковалев А. М. Построение функции Ляпунова со знакоопределенной производной для систем, удовлетворяющих теореме Барбашина–Красовского // Прикл. математика и механика. – 2008. – 72, вып. 2. – С. 266–272.
10. Ковалев А. М., Суйков А. С. Функции Ляпунова для систем, удовлетворяющих условиям теоремы Барбашина–Красовского // Докл. НАН Украины. – 2008. – № 12. – С. 22–27.
11. Понтрягин Л. С. Обыкновенные дифференциальные уравнения. – Москва: Наука, 1970. – 331 с.

*Институт прикладной математики  
и механики НАН Украины, Донецк*

*Поступило в редакцию 15.07.2013*

Академік НАН України **О. М. Ковальов, Г. В. Горр, В. М. Неспірний**

### **Інваріантні співвідношення неавтономних систем диференціальних рівнянь**

*Узагальнено метод інваріантних співвідношень Пуанкаре, Леви-Чивіти, Харламова на системі диференціальних рівнянь з правими частинами, що залежать від часу. Як приклад розглянуто рівняння руху неавтономного важкого гіростата, отримано умови існування рівномірних обертань і побудовано інваріантні многовиди.*

Academician of the NAS of Ukraine **A. M. Kovalev, G. V. Gorr, V. N. Nesporny**

### **Invariant relations for nonautonomous systems of differential equations**

*The method of invariant relations developed by Poincaré, Levi-Civita, and Kharlamov is generalized for differential equations with right-hand sides depending on the time. As an example, the motion equations of a nonautonomous heavy gyrost are considered, conditions for the existence of uniform rotational motions are obtained, and invariant manifolds are constructed.*



где  $x \in \mathbb{R}^n$ ,  $\{a_i\}_{i=1}^{n+1} \in \mathbb{R}$ . Получение условий на коэффициенты  $a_i$ ,  $i = \overline{1, n+1}$ , проводится с помощью метода функции Ляпунова, причем функцию Ляпунова для системы (1) удастся выбрать в виде квадратичной формы

$$V = (Fx, x), \quad (4)$$

где  $F$  —  $(n \times n)$  положительно определенная матрица. Продифференцируем (4), в силу системы (1) и с учетом (3) получим, что

$$\begin{aligned} \dot{V} = & ((A^*F + FA)x, x) + 2(F\tilde{e}_n, x)x_{n-1}^{2k+1} + 2(Fe_2, x)f_1(t, x_1, \dots, x_n) + \dots + \\ & + 2(Fe_n, x)f_{n-1}(t, x_1, \dots, x_n), \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & \dots & \dots & a_n \\ 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{e}_n = \begin{pmatrix} a_{n+1} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$e_i$  —  $i$ -й единичный вектор.

Рассмотрим матричное уравнение вида

$$A^*F + FA = -W, \quad (7)$$

где  $W = \{w_{ij}\}_{i,j=1}^n$  — некоторая заданная неотрицательно определенная действительная матрица, а матрица  $A = \{a_{ij}\}_{i,j=1}^n$  имеет вид (6),  $F = \{f_{ij}\}_{i,j=1}^n$  — неизвестная матрица.

*Замечание.* Поскольку матрица  $A$  является вырожденной, в отличие от хорошо исследованного в теории устойчивости случая, когда все собственные значения матрицы  $A$  имеют отрицательные действительные части, то уравнение (7) не может иметь положительно определенного решения  $F$  при положительно определенной матрице  $W$ .

Введем следующие обозначения:  $W_{n-1} = \{w_{ij}\}_{i,j=1}^{n-1}$ ,  $A_{n-1} = \{a_{ij}\}_{i,j=1}^{n-1}$ . В дальнейшем будем считать, что матрица  $W_{n-1}$  положительно определена.

Теорема 1 и теорема 2 дают ответ на вопросы о существовании и нахождении решений уравнения (7) относительно неизвестной матрицы  $F$  в классе положительно определенных матриц. В теореме 3 сформулирован способ построения стабилизирующего управления.

**Теорема 1.** Пусть матрица  $A$  имеет вид (6), матрица  $W_{n-1}$  положительно определена. Тогда для того чтобы матричное уравнение (7) имело положительно определенное решение  $F$  при некоторой неотрицательно определенной матрице  $W$ , необходимо и достаточно, чтобы собственные значения матрицы  $A_{n-1}$  имели отрицательные действительные части и при этом матрица  $W$  имела вид

$$W = \begin{pmatrix} w_{11} & \dots & w_{1n-1} & w_{1n-1} \frac{a_n}{a_{n-1}} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ w_{1n-1} & \dots & w_{n-1n-1} & w_{n-1n-1} \frac{a_n}{a_{n-1}} \\ w_{1n-1} \frac{a_n}{a_{n-1}} & \dots & w_{n-1n-1} \frac{a_n}{a_{n-1}} & w_{n-1n-1} \frac{a_n^2}{a_{n-1}^2} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Заметим, что матрица  $W$  вида (8) является неотрицательно определенной тогда и только тогда, когда матрица  $W_{n-1}$  неотрицательно определена.

**Теорема 2.** Пусть матрица  $W$  имеет вид (8), а матрица  $W_{n-1}$  положительно определена, тогда положительно определенное решение уравнения (7) имеет вид

$$F = \begin{pmatrix} f_{11} & \dots & f_{1n-1} & \frac{a_n}{a_{n-1}} f_{1n-1} \\ \dots & \ddots & \dots & \dots \\ f_{1n-1} & \dots & f_{n-1n-1} & \frac{a_n}{a_{n-1}} f_{n-1n-1} \\ \frac{a_n}{a_{n-1}} f_{1n-1} & \dots & \frac{a_n}{a_{n-1}} f_{n-1n-1} & f_{nn} \end{pmatrix},$$

где элементы матрицы  $F_{n-1} = \{f_{ij}\}_{i,j=1}^{n-1}$  находятся по формуле

$$F_{n-1} = \int_0^{\infty} e^{A_{n-1}^* t} W_{n-1} e^{A_{n-1} t} dt \gg 0,$$

$f_{nn}$  — произвольная величина такая, что  $f_{nn} > \frac{a_n^2}{a_{n-1}^2} f_{n-1n-1}$ .

Пусть  $b = -F\tilde{e}_n$ , тогда

$$b_i = -\left(f_{1i} a_{n+1} + \frac{a_n}{a_{n-1}} f_{in-1}\right), \quad i = \overline{1, n-1},$$

$$b_n = -\left(f_{1n-1} \frac{a_n}{a_{n-1}} a_{n+1} + f_{nn}\right).$$

Выберем  $a_{n+1}$  из условия  $b_n = 0$ , тогда

$$a_{n+1} = -\frac{f_{nn}}{f_{1n-1}} \frac{a_{n-1}}{a_n}. \quad (9)$$

Заметим, что  $b_{n-1} > 0$  при таком выборе  $a_{n+1}$ . Обозначим

$$\overline{W}_{\lambda_{\min}} = \begin{pmatrix} \lambda_{\min} & 0 & \dots & 0 & b_1 x_{n-1}^k \\ 0 & \lambda_{\min} & \dots & 0 & b_2 x_{n-1}^k \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_{\min} & b_{n-2} x_{n-1}^k \\ b_1 x_{n-1}^k & b_2 x_{n-1}^k & \dots & \dots & 2b_{n-1} \end{pmatrix},$$

где  $\lambda_{\min} > 0$  — минимальное собственное значение матрицы  $W_{n-1}$ .

Пусть положительно определенная матрица  $F$  является решением уравнения (7) при некоторой матрице  $W$ , удовлетворяющей условиям теоремы 1, тогда равенство (5) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \dot{V} = & -((W - \lambda_{\min} \tilde{I}_{n,2})x, x) - (\overline{W}_{\lambda_{\min}} \bar{x}, \bar{x}) + 2(Fe_2, x) f_1(t, x_1, \dots, x_n) + \dots + \\ & + 2(Fe_n, x) f_{n-1}(t, x_1, \dots, x_n), \end{aligned} \quad (10)$$

где  $\bar{x} = (x_1, \dots, x_{n-2}, x_{n-1}^{k+1})$ ,  $\tilde{I}_{n,2}$  — блочно-диагональная матрица, состоящая из единичной матрицы размерности  $(n-2) \times (n-2)$  и нулевой матрицы размерности  $(2 \times 2)$ .

Отметим, что матрица  $W - \lambda_{\min} \tilde{I}_{n,2}$  является неотрицательно определенной. Определитель матрицы  $\overline{W}_{\lambda_{\min}}$  имеет вид

$$\Delta(\overline{W}_{\lambda_{\min}}) = 2\lambda_{\min}^{n-2} b_{n-1} - \lambda_{\min}^{n-3} (b_1^2 + b_2^2 + \dots + b_{n-2}^2) x_{n-1}^{2k},$$

откуда следует, что при  $x_{n-1}^{2k} < \lambda_{\min} \frac{2b_{n-1}}{b_1^2 + \dots + b_{n-2}^2}$  матрица  $\overline{W}_{\lambda_{\min}}$  будет положительно определенной.

Выберем произвольное  $0 < \varepsilon < \lambda_{\min} \frac{2b_{n-1}}{b_1^2 + \dots + b_{n-2}^2}$  и потребуем, чтобы  $x_{n-1}^{2k} < \varepsilon$ . Тогда для минимального собственного значения матрицы  $\overline{W}_{\lambda_{\min}}$  верна оценка

$$\lambda_{\min}(\overline{W}_{\lambda_{\min}}) > \bar{\lambda}_{\min} = \frac{1}{2} \left( \lambda_{\min} + 2b_{n-1} - \sqrt{(\lambda_{\min} - 2b_{n-1})^2 + 4\varepsilon \sum_{i=1}^{n-2} b_i^2} \right) > 0.$$

Отсюда из (10) с учетом (2) получаем, что

$$\begin{aligned} \dot{V} \leq & -((W - \lambda_{\min} \tilde{I}_{n,2})x, x) - (\bar{\lambda}_{\min} - 2 \cdot |\alpha_1| \cdot \|Fe_2\| \cdot \|x\| - \dots - \\ & - 2 \cdot |\alpha_{n-1}| \cdot \|Fe_n\| \cdot \|x\|) \cdot \|\bar{x}\|^2 < 0 \end{aligned} \quad (11)$$

при

$$0 < \|x\| < r = \min \left\{ \rho, \sqrt[2k]{\varepsilon}, \frac{\bar{\lambda}_{\min}}{2 \sum_{i=1}^{n-1} |\alpha_i| \cdot \|Fe_{i+1}\|} \right\}.$$

Таким образом, управление  $u(x)$  вида (3) решает задачу стабилизации для системы (1) и справедлива следующая теорема.

**Теорема 3.** Пусть управление  $u(x)$  имеет вид (3) и при этом  $a_i < 0$ ,  $i = \overline{1, n}$ , такие, что собственные значения матрицы  $A_{n-1}$  имеют отрицательные действительные части. Матрица  $W_{n-1}$  — произвольная положительно определенная матрица, а матрица  $F$  является любым положительно определенным решением уравнения (7) с правой частью вида (8). Величина  $a_{n+1}$  выбирается из условия (9). Тогда управление  $u(x)$  будет решать задачу стабилизации для системы (1).

Пример. Рассмотрим управляемую систему вида

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = u, \\ \dot{x}_2 = x_1^3 + x_1^4 \sin(t + x_1^5 + x_2^2). \end{cases} \quad (12)$$

Тогда  $f_1(x_1, \dots, x_n) = x_1^4 \sin(t + x_1^5 + x_2^2) \leq x_1^4$ ,  $\alpha_1 = 1$ ,  $k = 1$ ,  $\rho = +\infty$ .

Пусть  $a_1 = -1$ ,  $a_2 = -2$ ,  $W_{11} = 10$ , тогда из (6), (8) получаем

$$A = \begin{pmatrix} -1 & -2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad W = \begin{pmatrix} 10 & 20 \\ 20 & 40 \end{pmatrix}.$$

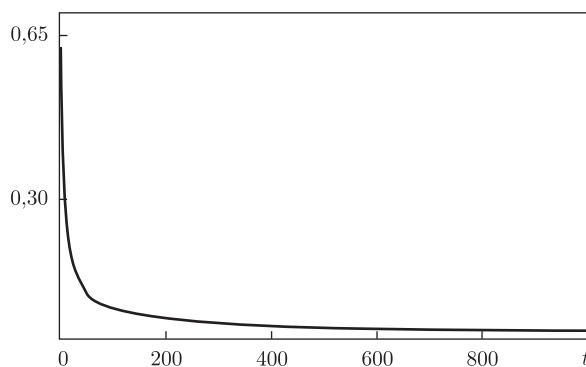


Рис. 1. График  $\|x(t)\|$

Положительно определенное решение уравнения (7) при  $f_{22} = 100$  имеет вид

$$F = \begin{pmatrix} 5 & 10 \\ 10 & 100 \end{pmatrix},$$

и в качестве функции Ляпунова системы (12) можно взять квадратичную форму вида (4). Тогда согласно (3) и (9) управление, решающее задачу стабилизации для системы (12), имеет вид

$$u(x) = -x_1 - 2x_2 - 10x_3^3.$$

Имеем, что  $\lambda_{\min}(F) = 3,9588\dots$  — минимальное собственное значение матрицы  $F$ ,  $r = 0,3980\dots$ . При этом область притяжения будет иметь вид

$$\Phi = \{x: (Fx, x) \leq \lambda_{\min}(F)r^2\} = \{5x_1^2 + 20x_1x_2 + 100x_2^2 \leq 0,6271\dots 0\}.$$

В качестве начальной точки возьмем  $x_0 = \begin{pmatrix} 0,43 \\ -0,45 \end{pmatrix}$ . В этом случае график  $\|x(t)\|$  имеет вид рис. 1.

Численный анализ показывает, что область притяжения  $\Phi$  может быть расширена за счет увеличения параметра  $f_{22}$ .

1. Коробов В. И. Метод функции управляемости. — Москва; Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, 2007. — 576 с.
2. Савченко А. Я., Игнатъев А. О. Некоторые задачи устойчивости неавтономных динамических систем. — Киев: Наук. думка, 1989. — 208 с.
3. Kawski M. Stabilization of nonlinear systems in the plane // Syst. Control. Lett. — 1989. — **12**. — P. 169–175.
4. Cheng D., Lin W. On p-normal forms of nonlinear systems // IEEE Trans. Autom. Control. — 2003. — **48**. — P. 1242–1248.
5. Hong Y., Wang J. Non-smooth finite-time stabilization for a class of nonlinear systems // Sci. China. Ser. F. — 2006. — **49**, No 1. — P. 80–89.
6. Long L., Zhao J. Global stabilisation of switched nonlinear systems in p-normal form with mixed odd and even powers // Int. J. Contr. — 2011. — **84**, No 10. — P. 1612–1626.
7. Liao D. Adaptive control for a class of high-order nonlinear uncertain systems // J. Theor. and Appl. Inform. Technol. — 2012. — **46**, No 1. — P. 371–376.
8. Gao F., Li P., Yuan F. Finite-time stabilization of high-order nonholonomic systems with more general nonlinear drifts // J. Inform. and Comput. Sci. — 2013. — **10**, No 4. — P. 1139–1147.

Щецинский университет, Польша  
Харьковский национальный университет  
им. В. Н. Каразина

Поступило в редакцию 15.07.2013



**В. І. Коробов, М. О. Бебія**

**Стабілізація деякого класу нелінійних систем, некерованих за першим наближенням**

*Розглянуто задачу стабілізації для нелінійних некерованих за першим наближенням систем вигляду  $\dot{x}_1 = u$ ,  $\dot{x}_i = x_{i-1} + f_{i-1}(t, x_1, \dots, x_n)$ ,  $\dot{x}_n = x_{n-1}^{2k+1} + f_{n-1}(t, x_1, \dots, x_n)$ ,  $i = \overline{2, n-1}$ . Для цих систем встановлено достатню умову існування квадратичної функції Ляпунова, наведено метод побудови функції Ляпунова і стабілізуючого керування.*

**V. I. Korobov, M. O. Bebiya**

**Stabilization of some class of nonlinear systems that are uncontrollable the first approximation**

*The problem of stabilization for systems of the form  $\dot{x}_1 = u$ ,  $\dot{x}_i = x_{i-1} + f_{i-1}(t, x_1, \dots, x_n)$ ,  $\dot{x}_n = x_{n-1}^{2k+1} + f_{n-1}(t, x_1, \dots, x_n)$ ,  $i = \overline{2, n-1}$ , that are uncontrollable in the first approximation is considered. The sufficient condition of existence of a quadratic Lyapunov function is obtained, and a method of construction of the Lyapunov function and the stabilizing control is described.*

## Нові властивості FD-методу при його застосуваннях до задач Штурма–Ліувілля

Доведено, що FD-метод при його застосуванні до розв'язування задачі Штурма–Ліувілля для звичайного диференціального рівняння другого порядку на відрізку з крайовими умовами Діріхле відносно власних значень має суттєво вищу швидкість збіжності, ніж це було встановлено в попередніх роботах В. Л. Макарова та його учнів. Викладено принципово новий алгоритм FD-методу, програмна реалізація якого засобами комп'ютерної алгебри показала свою високу ефективність.

Вперше FD-метод був запропонований у роботі [1] для розв'язування регулярної скалярної задачі Штурма–Ліувілля

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + (\lambda - q(x))u(x) = 0, \quad x \in (0, 1), \quad u(0) = u(1) = 0 \quad (1)$$

з кусково-сталим наближенням  $\bar{q}(x)$  коефіцієнта  $q(x)$ . Метод дозволяє при фіксованому параметрі дискретизації  $N$  (кількість сходинок у функції  $\bar{q}(x)$ ) визначити наближення до власних функцій і власних значень  $\{u_n(x), \lambda_n\}$  з точністю  $O((Nn)^{-m})$ , де  $m$  — ранг методу.

Пізніше в роботах [2, 3] доведені явні апріорні оцінки для випадку, коли кусково стала функція, що наближає  $q(x)$ , тотожно рівна нулю, тобто  $\bar{q}(x) \equiv 0$ :

$$\begin{aligned} |\lambda_n(q(\cdot)) - \lambda_n(0)| &\leq \|q\|_\infty \frac{(r_n^0)^m}{1 - r_n^0} 2 \frac{(2m-1)!!}{(2m+2)!!} \leq \|q\|_\infty \frac{(r_n^0)^m}{1 - r_n^0} \frac{1}{(m+1)\sqrt{\pi m}}, \\ \|u_n(x, q(\cdot)) - u_n(x, 0)\| &\leq \frac{(r_n^0)^{m+1}}{1 - r_n^0} 2 \frac{(2m+1)!!}{(2m+4)!!} \leq \frac{(r_n^0)^{m+1}}{1 - r_n^0} \frac{1}{(m+2)\sqrt{\pi(m+1)}}, \end{aligned} \quad (2)$$

де  $r_n^0 = 4\|q\|_\infty / (\pi^2(2n-1))$ ,  $\|q\|_\infty = \max_{x \in [0,1]} |q(x)|$ .

Розглянемо задачу (1), коли  $q(x) = \sum_{l=0}^r c_l x^l$  є поліном степеня  $r$ . Застосуємо до неї FD-метод з вибором функції  $\bar{q}(x)$ , що наближає  $q(x)$ , тотожної нулю (подібна ідеологія присутня в методі гомотопій, а також в методі Адомяна [4]). В цьому випадку FD-метод є таким, що точно реалізується [5]. Тоді наближення  $m$ -го рангу (за термінологією FD-методу) до розв'язку задачі (1) матиме вигляд

$$u_n^m(x) = \sum_{j=0}^m u_n^{(j)}(x), \quad \lambda_n^m = \sum_{j=0}^m \lambda_n^{(j)}. \quad (3)$$

Тут  $u_n^{(0)}(x) = \sqrt{2} \sin(\pi n x)$ ,  $\lambda_n^{(0)} = (n\pi)^2$  — розв'язок базової задачі

$$\frac{d^2 u_n^{(0)}(x)}{dx^2} + \lambda_n^{(0)} u_n^{(0)}(x) = 0, \quad x \in (0, 1), \quad u_n^{(0)}(0) = u_n^{(0)}(1) = 0.$$

Члени рядів (3) визначаються як розв'язки рекурентної послідовності задач

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_n^{(j+1)}(x)}{dx^2} + \lambda_n^{(0)} u_n^{(j+1)}(x) &= - \sum_{p=0}^j \lambda_n^{(j+1-p)} u_n^{(p)}(x) + q(x) u_n^{(j)}(x) \equiv \\ &\equiv -F_n^{j+1}(x), \quad x \in (0, 1), \\ u_n^{(j+1)}(0) = u_n^{(j+1)}(1) &= 0, \quad j = 0, 1, \dots, m-1, \end{aligned} \quad (4)$$

де

$$\lambda_n^{(j+1)} = \int_0^1 q(x) u_n^{(j)}(x) u_n^{(0)}(x) dx = \sqrt{2} \sum_{l=0}^r c_l \int_0^1 x^l u_n^{(j)}(x) \sin(\pi n x) dx. \quad (5)$$

Співвідношення (5) одержується з умов розв'язності задач (4), а для їх однозначної розв'язності вимагається додаткова умова ортогональності

$$\int_0^1 u_n^{(j+1)}(x) u_n^{(0)}(x) dx = 0, \quad j = 0, 1, \dots, m-1. \quad (6)$$

Введемо узагальнену функцію Гріна

$$\begin{aligned} g_n(x, \xi) &= \frac{1}{4\pi^2 n^2} (\cos(n\pi(x + \xi)) - \cos(n\pi(x - \xi)) - \\ &- 2\pi n [\sin(n\pi(x + \xi))(1 - x - \xi) - \sin(n\pi|x - \xi|)(1 - |x - \xi|)]), \end{aligned}$$

для якої справедливі такі властивості:

$$g_n(x, \xi) = g_n(\xi, x), \quad \int_0^1 g_n(x, \xi) \sin(n\pi x) dx = 0, \quad \int_0^1 g_n(x, \xi) \sin(n\pi \xi) d\xi = 0,$$

тоді при фіксованому  $j$  розв'язок задачі (4), що задовольняє умову ортогональності (6), можна записати у вигляді

$$u_n^{(j+1)}(x) = - \int_0^1 g_n(x, \xi) F_n^{(j+1)}(\xi) d\xi.$$

Має місце таке твердження.

**Теорема 1.** Нехай  $q(x) = \sum_{l=0}^r c_l x^l$ ,  $\langle q \rangle = \sum_{l=0}^r |c_l|$ . Тоді будуть справедливі співвідношення

$$\begin{aligned} \|u_n^{(j+1)}\| &= \left( \int_0^1 [u_n^{(j+1)}(x)]^2 dx \right)^{1/2} \leq \left( \frac{4\langle q \rangle}{\pi^2(2n-1)} \right)^{j+1} 2 \frac{(2j+1)!!}{(2j+4)!!} \leq \\ &\leq \left( \frac{4\langle q \rangle}{\pi^2(2n-1)} \right)^{j+1} \frac{1}{(j+2)\sqrt{\pi(j+1)}}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} ((2\pi n)^{2j} \lambda_n^{(j+1)}) = d_{j+1}, \quad (8)$$

де  $d_{j+1}$  — деякі сталі, причому  $|d_{j+1}| < \infty$ ,  $\forall j = 0, 1, \dots$

Спадання оцінок (2) поправок  $\lambda_n^{(j+1)}$  відносно  $n$  до нуля суттєво повільніше, ніж насправді, як видно з граничного співвідношення (8). Оцінка (7) була одержана в [2, 3]. При доведенні граничного співвідношення (8) суттєво використовуються результати В. О. Марченка [6].

Провівши необхідні аналітичні дослідження, отримали такі структурні представлення розв'язків задач (4), а саме при  $j = 0, 1, \dots$ :

$$u_n^{(2j+1)}(x) = \sum_{p=1}^{(2j+1)(r+1)} b_p^{(2j+1)} x^p \cos(\pi n x) + \sum_{p=0}^{(2j+1)(r+1)-1} a_p^{(2j+1)} x^p \sin(\pi n x), \quad (9)$$

$$u_n^{(2j)}(x) = \sum_{p=1}^{2j(r+1)-1} b_p^{(2j)} x^p \cos(\pi n x) + \sum_{p=0}^{2j(r+1)} a_p^{(2j)} x^p \sin(\pi n x), \quad (10)$$

справедливість яких доводиться методом математичної індукції.

Введемо позначення

$$P_{t+1}(x) = \frac{1}{(t+1)2\pi n} \sum_{s=0}^{[t/2]} \frac{(-1)^s x^{t+1-2s}}{(2\pi n)^{2s}} (t-2s+2)_{2s}, \quad (v)_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{(v+k-1)!}{(v-1)!},$$

$$z(t, x) \stackrel{\text{def}}{=} P_{t+1}(x) \sin(\pi n x) + \frac{t}{2\pi n} P_t(x) \cos(\pi n x),$$

$$z^T(t, x) \stackrel{\text{def}}{=} -P_{t+1}(x) \cos(\pi n x) + \frac{t}{2\pi n} P_t(x) \sin(\pi n x).$$

Використовуючи представлення (9), (10), приходимо до таких формул:

$$\begin{aligned} \tilde{u}_n^{(2j)}(x) &= - \sum_{p=0}^{j-1} \lambda_n^{(2j-2p)} \left[ \sum_{t=1}^{2p(r+1)-1} b_t^{(2p)} z(t, x) + \sum_{t=0}^{2p(r+1)} a_t^{(2p)} z^T(t, x) \right] - \\ &- \sum_{p=0}^{j-1} \lambda_n^{(2j-2p-1)} \left[ \sum_{t=1}^{(2p+1)(r+1)} b_t^{(2p+1)} z(t, x) + \sum_{t=0}^{(2p+1)(r+1)-1} a_t^{(2p+1)} z^T(t, x) \right] + \\ &+ \sum_{t=1}^{(2j-1)(r+1)} b_t^{(2j-1)} \sum_{l=1}^r c_l z(t+l, x) + \sum_{t=0}^{(2j-1)(r+1)-1} a_t^{(2j-1)} \sum_{l=1}^r c_l z^T(t+l, x), \\ \tilde{u}_n^{(2j+1)}(x) &= - \sum_{p=0}^{j-1} \lambda_n^{(2j-2p)} \left[ \sum_{t=1}^{(2p+1)(r+1)} b_t^{(2p+1)} z(t, x) + \sum_{t=0}^{(2p+1)(r+1)-1} a_t^{(2p+1)} z^T(t, x) \right] - \\ &- \sum_{p=0}^j \lambda_n^{(2j-2p+1)} \left[ \sum_{t=1}^{2p(r+1)-1} b_t^{(2p)} z(t, x) + \sum_{t=0}^{2p(r+1)} a_t^{(2p)} z^T(t, x) \right] + \end{aligned}$$

$$+ \sum_{t=1}^{2j(r+1)-1} b_t^{(2j)} \sum_{l=1}^r c_l z(t+l, x) + \sum_{t=0}^{2j(r+1)} a_t^{(2j)} \sum_{l=1}^r c_l z^T(t+l, x),$$

які з врахуванням співвідношень зв'язку

$$u_n^{(2j)}(x) = \tilde{u}_n^{(2j)}(x) + a_0^{(2j)} \sin(\pi n x), \quad u_n^{(2j+1)}(x) = \tilde{u}_n^{(2j+1)}(x) + a_0^{(2j+1)} \sin(\pi n x)$$

дають можливість легко одержати рекурентні співвідношення для коефіцієнтів  $b_p^{(2j)}$  ( $p = 1, \dots, 2j(r+1) - 1$ ),  $a_p^{(2j)}$  ( $p = 0, \dots, 2j(r+1)$ ),  $b_p^{(2j+1)}$  ( $p = 0, \dots, (2j+1)(r+1)$ ),  $a_p^{(2j+1)}$  ( $p = 0, \dots, (2j+1)(r+1) - 1$ ) через відповідні коефіцієнти функцій  $u_n^{(2p)}(x)$  ( $p = 0, \dots, j-1$ ) і  $u_n^{(2p-1)}(x)$  ( $p = 1, \dots, j$ ). Так, зокрема,

$$b_{(2j+1)(r+1)}^{(2j+1)} = -\frac{a_{2j(r+1)}^{(2j)} c_r}{2\pi n (2j+1)(r+1)},$$

$$a_{(2j+1)(r+1)-1}^{(2j+1)} = \frac{c_r}{2\pi n} \left[ \frac{b_{2j(r+1)-1}^{(2j)}}{(2j+1)(r+1) - 1} - \frac{a_{2j(r+1)}^{(2j)}}{(2j+1)(r+1)} \right].$$

Інші рекурентні формули для коефіцієнтів ми не наводимо через їх громіздкість.

Для поправок до власних значень на непарних і парних кроках відповідно маємо формули

$$\lambda_n^{(2j+1)} = - \sum_{p=1}^{2j(r+1)-1} b_p^{(2j)} \sum_{l=1}^r c_l \beta_{p+l} + \sum_{p=0}^{2j(r+1)} a_p^{(2j)} \sum_{l=1}^r c_l \left[ \frac{\sqrt{2}}{2(p+l+1)} + \alpha_{p+l} \right],$$

$$\lambda_n^{(2j+2)} = - \sum_{p=1}^{(2j+1)(r+1)} b_p^{(2j+1)} \sum_{l=1}^r c_l \beta_{p+l} + \sum_{p=0}^{(2j+1)(r+1)-1} a_p^{(2j+1)} \sum_{l=1}^r c_l \left[ \frac{\sqrt{2}}{2(p+l+1)} + \alpha_{p+l} \right],$$

де

$$\beta_p \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\sqrt{2}}{2} \int_0^1 x^p \sin(2\pi n x) dx = \frac{\sqrt{2}}{4\pi n} \sum_{i=0}^{p-1} \frac{p! \sin\left(\frac{i+1}{2}\pi\right)}{(p-i)!(2\pi n)^i},$$

$$\alpha_p \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\sqrt{2}}{2} \int_0^1 x^p \cos(2\pi n x) dx = \frac{\sqrt{2}}{4\pi n} \sum_{i=0}^{p-1} \frac{p! \cos\left(\frac{i+1}{2}\pi\right)}{(p-i)!(2\pi n)^i},$$

$$a_0^{(2j)} \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{2} \left( \sum_{p=1}^{2j(r+1)-1} b_p^{(2j)} \beta_p - \sum_{p=1}^{2j(r+1)} a_p^{(2j)} \left[ \frac{\sqrt{2}}{2(p+1)} + \alpha_p \right] \right),$$

$$a_0^{(2j+1)} \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{2} \left( \sum_{p=1}^{(2j+1)(r+1)} b_p^{(2j+1)} \beta_p - \sum_{p=1}^{(2j+1)(r+1)-1} a_p^{(2j+1)} \left[ \frac{\sqrt{2}}{2(p+1)} + \alpha_p \right] \right).$$

Викладене вище фактично є принципово новою алгоритмічною реалізацією FD-методу з  $\bar{q}(x) \equiv 0$ , яка не вимагає ані розв'язування крайових задач (4), ані інтегрування за

формулами (5), (6), треба тільки виконувати звичайні арифметичні дії. Тому програмна реалізація цього алгоритму засобами комп'ютерної алгебри є дуже ефективною і дає змогу одержувати наближення  $m$ -го рангу за FD-методом для як завгодно великого  $m$ .

*Зауваження.* З теореми 1 випливає, що може існувати такий поліном  $q(x)$ , що  $\exists n_0$ , для якого при  $n < n_0$  FD-метод для власних значень  $\lambda_n$  є збіжним, а для власних функцій  $u_n$  — розбіжним. Це підтверджується чисельними експериментами, зокрема при  $q(x) = 40x$  таке  $n_0$  виявляється рівним 4.

Приклад. Нехай  $q(x) = \sum_{l=0}^2 c_l x^l$ , тоді за допомогою вищенаведеного алгоритму одержуємо

$$\begin{aligned} \lambda_n^{(1)} &= c_0 + \frac{1}{2}c_1 + \frac{1}{3}c_2 - \frac{c_2}{2\pi^2 n^2}, \\ \lambda_n^{(2)} &= \frac{15c_1^2 + 30c_1c_2 + 16c_2^2}{720\pi^2 n^2} - \frac{5}{48} \frac{3c_1^2 + 6c_1c_2 + 4c_2^2}{\pi^4 n^4} + \frac{7c_2^2}{8\pi^6 n^6}, \\ \lambda_n^{(3)} &= \frac{1}{30240} \frac{c_2(63c_1^2 + 126c_1c_2 + 64c_2^2)}{\pi^4 n^4} - \frac{c_2(15c_1^2 + 30c_1c_2 + 16c_2^2)}{48\pi^6 n^6} + \frac{31}{32} \frac{c_2(3c_1^2 + 6c_1c_2 + 4c_2^2)}{\pi^8 n^8} - \\ &\quad - \frac{121c_2^3}{16\pi^{10} n^{10}}, \\ \lambda_n^{(4)} &= \frac{315c_1^4 + 1260c_1^3c_2 + 2085c_1^2c_2^2 + 1650c_1c_2^3 + 512c_2^4}{725760\pi^6 n^6} - \\ &\quad - \frac{1575c_1^4 + 6300c_1^3c_2 + 11907c_1^2c_2^2 + 11214c_1c_2^3 + 4096c_2^4}{17280\pi^8 n^8} + \\ &\quad + \frac{1100c_1^4 + 4400c_1^3c_2 + 15745c_1^2c_2^2 + 22690c_1c_2^3 + 10928c_2^4}{1280\pi^{10} n^{10}} - \\ &\quad - \frac{14573}{768} \frac{c_2^2(3c_1^2 + 6c_1c_2 + 4c_2^2)}{\pi^{12} n^{12}} + \frac{17771c_2^4}{128\pi^{14} n^{14}}. \end{aligned}$$

Звідси

$$\begin{aligned} d_2 &= \frac{1}{180}(15c_1^2 + 30c_1c_2 + 16c_2^2), & d_3 &= \frac{c_2}{1840}(63c_1^2 + 126c_1c_2 + 64c_2^2), \\ d_4 &= \frac{1}{11340}(315c_1^4 + 1260c_1^3c_2 + 2085c_1^2c_2^2 + 1650c_1c_2^3 + 512c_2^4). \end{aligned}$$

Вирази для поправок до власних функцій  $u_n^{(j)}(x)$  не наводимо у зв'язку з тим, що швидкість їх збіжності відносно  $n$  задовольняє оцінку (7), яка доведена в роботах [2, 3].

1. Макаров В. Л. О функционально-разностном методе произвольного порядка точности решения задачи Штурма–Лиувилля с кусочно-гладкими коэффициентами // Докл. АН СССР. – 1991. – **320**, № 1. – С. 34–39.
2. Бандирський Б. Й., Макаров В. Л., Уханьов О. Л. FD-метод для задач Штурма–Лиувилля. Експоненційна швидкість збіжності // Журн. обчисл. прикл. математики. – 2000. – **85**, № 1. – С. 1–60.
3. Макаров В. Л. FD-метод – експоненціальна швидкість збіжності // Обчисл. та прикл. математика. – 1997. – **82**. – С. 69–74.
4. Adomian G. Solving frontier problems of physics: the decomposition method. – Dordrecht: Kluwer, 1994. – 352 p.
5. Makarov V. L., Vinokur V. V. The FD method for first-order linear hyperbolic differential equations with piecewise smooth coefficients // J. Math. Sci. – 1995. – **77**, No 5. – P. 3399–3405.
6. Марченко В. А. Операторы Штурма–Лиувилля и их приложения. – Киев: Наук. думка, 1977. – 330 с.

Інститут математики НАН України, Київ

Надійшло до редакції 10.09.2013

Академик НАН Украины **В. Л. Макаров, Н. Н. Романюк**

### **Новые свойства FD-метода при его применениях к задачам Штурма–Лиувилля**

*Доказано, что FD-метод при его применении к решению задачи Штурма–Лиувилля для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка на отрезке с краевыми условиями Дирихле относительно собственных значений имеет существенно более высокую скорость сходимости, чем это было установлено в предыдущих работах В. Л. Макарова и его учеников. Изложен принципиально новый алгоритм FD-метода, программная реализация которого средствами компьютерной алгебры показала свою высокую эффективность.*

Academician of the NAS of Ukraine **V. L. Makarov, N. M. Romanyuk**

### **New properties of the FD-method in its applications to the Sturm-Liouville problems**

*We prove that the FD-method, when applied to the Sturm–Liouville problem for a second-order ordinary differential equation with Dirichlet boundary conditions, converges faster than as compared with the result of the previous articles by V. L. Makarov and his students. A substantially new algorithm for the FD-method is presented and shown to be highly effective, when implemented with the use of a computer algebra software.*

## Характеризація властивості Гана

(Представлено членом-кореспондентом НАН України В. В. Шарком)

Доведено нове узагальнення теореми Калбрі–Троалліка і для берівського простору  $X$ , метризовного компакта  $Y$  та метричного простору  $Z$  знайдено необхідні і достатні умови на відображення  $f: X \times Y \rightarrow Z$ , щоб для нього множина точок  $x$  з  $X$  таких, що  $f$  сукупно неперервне в кожній точці множини  $\{x\} \times Y$ , була залишковою в  $X$ .

1. Дослідження задачі про зв'язки між нарізною та сукупною неперервністю, розпочате в класичних працях Р. Бера та В. Осгуда, знайшло своє продовження в працях багатьох математиків ХХ ст. Одним із варіантів цієї задачі є питання про наявність у відображенні  $f: X \times Y \rightarrow Z$  властивості Гана, тобто існування залишкової множини  $A \subseteq X$  такої, що  $A \times Y \subseteq C(f)$ , де  $C(f)$  — множина точок неперервності відображення  $f$ . Починаючи з умови нарізної неперервності відображень  $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ , знайдено велику кількість достатніх умов існування у відображення  $f: X \times Y \rightarrow Z$  властивості Гана. Ці умови стосуються як самого відображення  $f$ , так і просторів  $X$ ,  $Y$  та  $Z$ . Питання про необхідні і достатні умови існування у відображення властивості Гана досі не розглядалися.

Відправним пунктом даного дослідження є теорема Калбрі–Троалліка з [1], згідно з якою для довільних топологічних просторів  $X$  і  $Y$ , метризовного простору  $Z$ , нарізно неперервного відображення  $f: X \times Y \rightarrow Z$  і множини  $B$  зліченного типу в  $Y$  множина  $C_B(f) = \{x \in X: \{x\} \times B \subseteq C(f)\}$  є залишковою в  $X$ . Як негайний наслідок цього, в [1] отримано такі результати: якщо  $X$  — топологічний простір, простір  $Y$  задовольняє першу (другу) аксіому зліченності, а  $Z$  — метричний простір, то для кожного  $y \in Y$  множина  $C_y(f) = C_{\{y\}}(f)$  залишкова (множина  $C_Y(f)$  залишкова) в  $X$ . Ці наслідки були перенесені в [2] на  $KC$ -функції, а в [3] — на  $K_hC$ -функції, але аналогу загальної теореми Калбрі–Троалліка для множин зліченного типу довгий час не було знайдено ні для  $KC$ -функцій, ні, тим більше, для  $K_hC$ -функцій. Лише в [4] теорему Калбрі–Троалліка було узагальнено на функції з ширшого класу  $\mathcal{M}$ .

А. Бузіад і Ж. Троаллік в [5] отримали інше узагальнення теореми Калбрі–Троалліка: для довільних топологічних просторів  $X$  і  $Y$ , метричного простору  $Z$ , зліченної сім'ї  $\mathcal{B}$  непорожніх множин в  $Y$ , відображення  $f: X \times Y \rightarrow Z$  такого, що для кожної множини  $V \in \mathcal{B}$  многозначне відображення  $F_V: X \ni x \rightarrow f_x(V) \in 2^Z$  квазінеперервне знизу, існує залишкова в  $X$  множина  $A$  така, що коли відображення  $f^a$  неперервне в точці  $b \in Y$  і деяка база околів точки  $b$  міститься в  $\mathcal{B}$ , то відображення  $f$  неперервне за сукупністю змінних в точці  $(a, b)$ . Зауважимо, що квазінеперервність знизу відображення  $F_V: X \ni x \mapsto f_x(V) \in 2^Z$  для кожної відкритої непорожньої множини  $V \in \mathcal{B}$  рівносильна слабкій горизонтальній квазінеперервності [6] відображення  $f: X \times Y \rightarrow Z$ .

Результати з [4, 5] було узагальнено в [7] і одержано такий результат: якщо  $X$  і  $Y$  — топологічні простори,  $Z$  — метричний простір,  $\mathcal{V}$  — не більш ніж зліченна система множин в  $Y$ ,  $\mathcal{V}_y = \{V \in \mathcal{V}: V \text{ — окіл точки } y \text{ в } Y\}$ ,  $B(\mathcal{V}) = \{y \in Y: \mathcal{V}_y \text{ — база околів точки } y \text{ в } Y\}$ ,



$f: X \times Y \rightarrow Z$  — таке відображення, що для кожної множини  $V \in \mathcal{V}$ , для якої  $V \cap B(\mathcal{V}) \neq \emptyset$ , відображення  $F_V: X \ni x \mapsto F_V(x) = f^x(V) \subseteq Z$  псевдоквазінеперервне знизу та покриттєво категорно клікове знизу, то множина  $R = \{x \in X: \{x\} \times (C(f^x) \cap B(\mathcal{V})) \subseteq C(f)\}$  є залишковою в  $X$ .

Усі перелічені результати дають лише достатні умови існування множини  $C(f)$  певного типу. В цій роботі ми узагальнимо результат з [7], а також одержимо необхідні і достатні умови того, що відображення  $f: X \times Y \rightarrow Z$  має властивість Гана (теорема 3). Попередній варіант теореми 3 був анонсований у [8].

2. Нехай  $X$  і  $Z$  — топологічні простори. Для множини  $A \subseteq X$  її образ при багатозначному відображенні  $F$  — це множина

$$F(A) = \{z \in Z: (\exists x \in A)(z \in F(x))\} = \bigcup_{x \in A} F(x).$$

Багатозначне відображення  $F: X \rightarrow Z$  називається *псевдоквазінеперервним знизу* [7], якщо для кожної непорожньої відкритої множини  $U$  в  $X$  і довільної підмножини  $A \subseteq X$  такої, що  $U \subseteq \overline{A}$ , існує відкрита непорожня множина  $G$  в  $X$  така, що  $G \subseteq U$  і  $F(G) \subseteq \overline{F(A)}$ . Багатозначне відображення  $F: X \rightarrow Z$  називається *покриттєво категорно кліковим знизу* [7], якщо для кожного відкритого покриття  $\mathcal{W}$  простору  $Z$  і довільної множини  $E$  другої категорії в  $X$  існують деякі щільна в  $X$  множина  $A$  і множина  $W \in \mathcal{W}$  такі, що  $A \subseteq E$  і  $F(x) \cap W \neq \emptyset$  для всіх  $x \in A$ .

Нехай  $X$  і  $Y$  — топологічні простори, а  $Z$  — метричний простір з метрикою  $d$ . Для непорожньої множини  $E \subseteq Z$  через  $\text{diam}(E) = \sup_{u,v \in E} d(u,v)$  позначимо її діаметр, а для функції

$f: X \rightarrow Z$  позначимо через  $\omega_f(A) = \text{diam}(f(A))$  коливання функції  $f$  на множині  $A$ . Через  $B_r(z_0) = \{z \in Z: d(z, z_0) < r\}$  позначимо відкриту кулю з центром в точці  $z_0$  і радіуса  $r$ .

Нехай  $F: X \rightarrow Z$  — багатозначне відображення. Ми кажемо, що багатозначне відображення  $F: X \rightarrow Z$  *задовольняє умову (A)*, якщо для довільних чисел  $0 < \alpha < \beta$ , довільної відкритої непорожньої множини  $U$  в  $X$  і довільної множини  $E \subseteq X$ , щільної в  $U$ , для яких  $\text{diam}(F(E)) < \alpha$ , існує відкрита непорожня множина  $G$  в  $X$  така, що  $G \subseteq U$  і  $\text{diam}(F(G)) < \beta$ . Багатозначне відображення  $F: X \rightarrow Z$  називається *категорно кліковим знизу* [7], якщо для кожного  $\varepsilon > 0$  і довільної множини  $E$  другої категорії в  $X$  існують деякі щільна в  $X$  множина  $A$  і відображення  $g: A \rightarrow Z$  такі, що  $A \subseteq E$ ,  $g(x) \in F(x)$  для кожного  $x \in A$  і  $\text{diam}(g(A)) < \varepsilon$ .

Спершу зазначимо, що коли  $Z$  — сепарабельний метричний простір, то довільне багатозначне відображення  $F: X \rightarrow Z$  є категорно кліковим знизу.

**Твердження 1.** *Нехай  $X$  — топологічний простір,  $Z$  — метричний простір з метрикою  $d$  і  $F: X \rightarrow Z$  — багатозначне відображення. Тоді:*

- 1) якщо  $F$  псевдоквазінеперервне знизу, то  $F$  задовольняє умову (A);
- 2) якщо  $F$  покриттєво категорно клікове знизу, то  $F$  категорно клікове знизу.

**Доведення.** Спочатку перевіримо 1. Візьмемо довільні числа  $0 < \alpha < \beta$ , відкриту непорожню множину  $U$  в  $X$  і щільну в  $U$  множину  $E \subseteq X$ , для яких  $\text{diam}(F(E)) < \alpha$ . Оскільки відображення  $F$  псевдоквазінеперервне знизу, то існує відкрита непорожня множина  $G$  в  $X$  така, що  $G \subseteq U$  і  $F(G) \subseteq \overline{F(E)}$ . Тоді

$$\text{diam}(F(G)) \leq \text{diam}(\overline{F(E)}) = \text{diam}(F(E)) < \alpha < \beta.$$

Тепер перевіримо 2. Візьмемо довільне  $\varepsilon > 0$  і довільну множину  $E$  другої категорії в  $X$ . Розглянемо відкрите покриття  $\mathcal{W} = \{B_{\varepsilon/3}(z): z \in Z\}$  простору  $Z$ . З покриттєвої категорної

кліковості знизу відображення  $F$  впливає, що існують десь щільна в  $X$  множина  $A$  і множина  $W \in \mathcal{W}$  такі, що  $A \subseteq E$  і  $F(x) \cap W \neq \emptyset$  для всіх  $x \in A$ . Оскільки  $W \in \mathcal{W}$ , то існує точка  $z_0 \in Z$  така, що  $W = B_{\frac{\varepsilon}{3}}(z_0)$ . Для кожної точки  $x \in A$  виберемо точку  $z_x \in F(x) \cap W$ . Тоді для відображення  $g: A \rightarrow Z$ ,  $g(x) = z_x$  маємо, що  $g(x) \in F(x)$  для кожного  $x \in A$  і  $g(A) \subseteq W$ . Тому  $\text{diam}(g(A)) \leq 2\varepsilon/3 < \varepsilon$ .

Приклад 1. Нехай  $\mathbb{Q} = \{r_n: n \in \mathbb{N}\}$  — множина раціональних точок. Розглянемо функцію  $F: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ , що визначена формулою

$$F(x) = \begin{cases} \left\{ \frac{1}{n} \right\}, & x = r_n, \\ \{0\}, & x \notin \mathbb{Q}. \end{cases}$$

Функція  $F$  задовольняє умову (A), але не є псевдоквазінеперервною знизу.

**3.** Для доведення основного результату нам буде потрібна така лема.

**Лема 1.** *Нехай  $X$  — топологічний простір,  $Z$  — метричний простір з метрикою  $d$ ,  $\varepsilon > 0$ , многозначне відображення  $F: X \rightarrow Z$  задовольняє умову (A) і є категорно кліковим знизу,  $E$  — множина другої категорії в  $X$  і  $E \subseteq \{x \in X: \text{diam}(F(x)) < \varepsilon\}$ . Тоді існує відкрита непорожня множина  $G$  в  $X$  така, що  $G \subseteq \overline{E}$  і  $\text{diam}(F(G)) < 3\varepsilon$ .*

**Доведення.** З категорної кліковості знизу відображення  $F$  випливає, що існують десь щільна множина  $E_1$  в  $X$  і відображення  $g: E_1 \rightarrow Z$  такі, що  $E_1 \subseteq E$ ,  $g(x) \in F(x)$  для кожного  $x \in E_1$  і  $\text{diam}(g(E_1)) < \varepsilon/2$ . Покажемо, що  $\text{diam}(F(E_1)) < 8\varepsilon/3$ .

Візьмемо точки  $z_1, z_2 \in F(E_1)$ . Тоді існують точки  $x_1, x_2 \in E_1$  такі, що  $z_i \in F(x_i)$  для  $i = 1, 2$ . В такому разі

$$d(z_1, z_2) \leq d(z_1, g(x_1)) + d(g(x_1), g(x_2)) + d(g(x_2), z_2) < \varepsilon + \frac{\varepsilon}{2} + \varepsilon = \frac{5\varepsilon}{2}.$$

Отже,  $\text{diam}(F(E_1)) \leq 5\varepsilon/2 < 8\varepsilon/3$ .

Покладемо  $U = \text{int } \overline{E_1}$ ,  $\alpha = 8\varepsilon/3$  і  $\beta = 3\varepsilon$ . Згідно з умовою (A) існує відкрита непорожня множина  $G$  в  $X$  така, що  $G \subseteq \overline{E_1} \subseteq \overline{E}$  і  $\text{diam}(F(G)) < 3\varepsilon$ .

Для відображення  $f$  символом  $D(f)$  ми позначимо його множину точок розриву, тобто доповнення до множини  $C(f)$  його точок неперервності. Нехай  $\mathcal{V}$  — деяка система множин у просторі  $Y$ . Для точки  $y \in Y$  покладемо

$$\mathcal{V}(y) = \{V \in \mathcal{V}: V \text{ — окіл точки } y \text{ в } Y\}$$

і

$$B(\mathcal{V}) = \{y \in Y: \mathcal{V}(y) \text{ — база околів точки } y \text{ в } Y\}.$$

Для відображення  $f: X \times Y \rightarrow Z$  і непорожньої множини  $V$  в  $Y$  розглядатимемо многозначне відображення  $F_V: X \ni x \mapsto F_V(x) = f^x(V) \subseteq Z$ .

**Теорема 1.** *Нехай  $X$  і  $Y$  — топологічні простори,  $Z$  — метричний простір,  $\mathcal{V} = \{V_n: n \in \mathbb{N}\}$  — не більш ніж зліченна система множин в  $Y$ ,  $f: X \times Y \rightarrow Z$  — така функція, що для кожної множини  $V \in \mathcal{V}$ , для якої  $V \cap B(\mathcal{V}) \neq \emptyset$ , відображення  $F_V$  задовольняє умову (A) і є категорно кліковим знизу. Тоді множина*

$$R = \{x \in X: \{x\} \times (C(f^x) \cap B(\mathcal{V})) \subseteq C(f)\}$$

є замкнутою в  $X$ .

**Доведення.** Припустимо, що доповнення

$$E_0 = X \setminus R = \{x \in X : \exists y_x \in C(f^x) \cap B(\mathcal{V}) | p_x = (x, y_x) \in D(f)\}$$

є множиною другої категорії в  $X$ . Для номерів  $m$  і  $n$  розглянемо множини

$$A_{m,n} = \left\{ x \in E_0 : \omega_f(p_x) > \frac{1}{m}, V_n \in \mathcal{V}(y_x), \omega_{f^x}(V_n) < \frac{1}{3m} \right\}.$$

Якщо  $x \in E_0$ , то  $p_x = (x, y_x) \in D(f)$  і  $y_x \in C(f^x) \cap B(\mathcal{V})$ , тому  $\omega_f(p_x) > 0$ ,  $\omega_{f^x}(y_x) = 0$  і  $y_x \in B(\mathcal{V})$ , звідки негайно випливає, що існують такі номери  $m$  і  $n$ , що  $\omega_f(p_x) > 1/m$ ,  $\omega_{f^x}(V_n) < 1/(3m)$  і  $V_n \in \mathcal{V}(y_x)$ . Це показує, що  $\bigcup_{m,n=1}^{\infty} A_{m,n} = E_0$ . Оскільки  $E_0$  — це множина другої категорії, то існують номери  $m$  і  $n$  такі, що множина  $E = A_{m,n}$  теж є множиною другої категорії.

Зауважимо, що для множини  $V = V_n \in \mathcal{V}$  перетин  $V \cap B(\mathcal{V}) \neq \emptyset$ , бо  $A_{m,n} \neq \emptyset$ , адже  $A_{m,n}$  є множиною другої категорії, а тому існує точка  $a \in A_{m,n}$  і для неї  $V \in \mathcal{V}(y_a)$ , причому  $y_a \in B(\mathcal{V})$  за побудовою, отже,  $y_a \in V \cap B(\mathcal{V})$ . Тому за умовою багатозначне відображення  $F_V : X \rightarrow Z$  задовольняє умову (A) і є категорно кліковим знизу.

Для відображення  $F_V$  виконуються всі умови леми 1, згідно з якою існує відкрита непорожня множина  $G$  в  $X$  така, що  $G \subseteq \overline{E}$  і  $\text{diam}(F_V(G)) < 1/m$ . Тоді

$$\omega_f(G \times V) = \text{diam } f(G \times V) = \text{diam } F_V(G) < \frac{1}{m}.$$

Оскільки  $G \subseteq \overline{E}$  і множина  $G$  відкрита, то  $G \subseteq \overline{G \cap E}$ . Але  $G \neq \emptyset$ , отже, і  $G \cap E \neq \emptyset$ . Візьмемо якусь точку  $x_0 \in G \cap E$ . Ясно, що відкрита множина  $G \times V$  буде околom точки  $p_{x_0} = (x_0, y_{x_0})$  в добутку  $X \times Y$ , бо  $x_0 \in G$ ,  $y_{x_0} \in V$  і множини  $G$  та  $V$  відкриті у відповідних просторах. Тому  $\omega_f(p_{x_0}) \leq \omega_f(G \times V) \leq 1/m$ . З іншого боку,  $x_0 \in E \subseteq \overline{E} = A_{m,n}$ . Тому  $\omega_f(p_{x_0}) > 1/m$ . Отримана суперечність доводить, що доповнення  $X \setminus R$  насправді є множиною першої категорії, а  $R$  є залишковою множиною в  $X$ .

Твердження 1 та приклад 1 показують, що теорема 1 сильніша за відповідну теорему з [7].

Як і в [1], підмножину  $B$  топологічного простору  $Y$  ми називаємо *множиною зліченного типу*, якщо існує така не більш ніж зліченна система  $\mathcal{V}_B = \{V_n : n \in \mathbb{N}\}$  відкритих множин  $V_n$  в  $Y$ , що для кожної точки  $y \in B$  система  $\mathcal{V}_B(y) = \{V_n : y \in V_n\}$  є базою околів точки  $y$  в просторі  $Y$ . Така система  $\mathcal{V}_B$  називається *зліченною базою для  $B$* . Увесь простір  $Y$  є множиною зліченного типу тоді і тільки тоді, коли він має не більш ніж зліченну базу, тобто задовольняє другу аксіому зліченності, а виконання першої аксіоми зліченності в  $Y$  означає, що всі одноточкові множини  $\{y\}$  в  $Y$  є множинами зліченного типу.

Як наслідок з теореми 1 одержуємо такий результат.

**Наслідок 1.** Нехай  $X$  і  $Y$  — топологічні простори,  $Z$  — метричний простір,  $B$  — множина зліченного типу в  $Y$ ,  $f : X \times Y \rightarrow Z$  — така функція, що для кожної множини  $V \in \mathcal{V}_B$ , для якої  $V \cap B \neq \emptyset$ , відображення  $F_V$  задовольняє умову (A) та є категорно кліковим знизу і множина  $M = \{x \in X : B \subseteq C(f^x)\}$  залишкова в  $X$ . Тоді існує залишкова в  $X$  множина  $A$  така, що  $A \times B \subseteq C(f)$ .

**Доведення.** Для системи  $\mathcal{V}_B$  множина  $B(\mathcal{V}_B) = B$ . Тоді з теореми 1 випливає, що множина

$$R = \{x \in X : \{x\} \times (C(f^x) \cap B(\mathcal{V})) \subseteq C(f)\}$$

є залишковою в  $X$ . Зауважимо, що  $C(f^x) \cap B(\mathcal{V}_B) = B$  для  $x \in M$ . Множина  $A = R \cap M$  є залишковою в  $X$  і  $A \times B \subseteq C(f)$ .

4. Кажуть [2], що функція  $f: X \times Y \rightarrow Z$  має властивість Гана, якщо існує залишкова в  $X$  множина  $A$  така, що функція  $f$  неперервна за сукупністю змінних у кожній точці множини  $A \times Y$ .

**Наслідок 2.** Нехай  $X$  – топологічний простір, простір  $Y$  задовольняє другу аксіому зліченності,  $\mathcal{V}$  – база простору  $Y$ ,  $Z$  – метричний простір, функція  $f: X \times Y \rightarrow Z$  така, що для кожної множини  $V \in \mathcal{V}$  відображення  $F_V$  задовольняє умову (A) та є категорно кліковим знизу і множина  $M = \{x \in X: B \subseteq C(f^x)\}$  залишкова в  $X$ . Тоді  $f$  має властивість Гана.

**Доведення.** Доведення випливає з наслідку 1 з урахуванням того, що  $B = Y$ .

**Теорема 2.** Нехай  $X$  – берівський простір,  $Y$  – компактний простір,  $Z$  – метричний простір з метрикою  $d$ ,  $f: X \times Y \rightarrow Z$  – функція, яка має властивість Гана. Тоді для довільної непорожньої множини  $N$  в  $Y$  многозначне відображення  $F_N$  задовольняє умову (A) та є категорно кліковим знизу і множина  $M = \{x \in X: C(f^x) = Y\}$  залишкова в  $X$ .

**Доведення.** Оскільки функція  $f$  задовольняє властивість Гана, то існує залишкова в  $X$  множина  $A$  така, що функція  $f$  неперервна за сукупністю змінних у кожній точці множини  $A \times Y$ . Тому для кожної точки  $x \in A$  функція  $f^x$  неперервна в кожній точці  $y \in Y$ . Отже,  $M \supseteq A$  і тому множина  $M$  є залишковою в  $X$ .

Візьмемо довільну непорожню множину  $N$  в  $Y$  і розглянемо многозначне відображення  $F_N$ . Покажемо, що відображення  $F_N$  категорно клікове. Візьмемо довільне  $\varepsilon > 0$ , довільну множину  $E$  другої категорії в  $X$ . Оскільки множина  $E$  другої категорії, то вона десь щільна в  $X$ . Нехай  $E$  щільна в деякій відкритій непорожній множині  $U$  в  $X$ , тобто  $\overline{E} \supseteq U$ . В берівському просторі кожна залишкова множина є всюди щільною, тому множина  $A$  всюди щільна в  $X$ . Візьмемо довільні точки  $x \in U \cap A$  і  $y \in N$ . Оскільки функція  $f$  неперервна в точці  $(x, y)$ , то існують відкриті непорожні множини  $G$  в  $X$  і  $H$  в  $Y$  такі, що  $x \in G \subseteq U$ ,  $y \in H$  і  $\omega_f(G \times H) < \varepsilon$ . Покладемо  $E_1 = E \cap G$ . Оскільки множина  $E$  щільна в  $U$  і  $G \subseteq U$ , то множина  $E_1$  щільна в  $G$ . Розглянемо відображення  $g: E_1 \rightarrow Z$ , для якого  $g(u) = f(u, y)$  при  $u \in E_1$ . Тоді

$$\text{diam}(g(E_1)) = \text{diam}(f(E_1 \times \{y\})) = \omega_f(E_1 \times \{y\}) \leq \omega_f(G \times H) < \varepsilon.$$

Отже, відображення  $F_E$  категорно клікове знизу.

Тепер покажемо, що відображення  $F_N$  задовольняє умову (A). Візьмемо довільні числа  $0 < \alpha < \beta$ , довільну відкриту непорожню множину  $U$  в  $X$ , довільну множину  $E \subseteq X$ , щільну в  $U$ , для якої  $\text{diam}(F_N(E)) < \alpha$ . Оскільки множина  $A$  всюди щільна в  $X$ , то існує точка  $x_0 \in U \cap A$ . Для довільної точки  $y \in Y$  функція  $f$  неперервна в точці  $(x_0, y)$ . Тому для кожної точки  $y \in Y$  існують окіл  $U(y)$  точки  $x_0$  в  $X$  і відкритий окіл  $V(y)$  точки  $y$  в  $Y$  такі, що  $\omega_f(U(y) \times V(y)) < (\beta - \alpha)/4$ . Система множин  $\{V(y): y \in Y\}$  є відкритим покриттям компактного простору  $Y$ . Отже, існують точки  $y_1, y_2, \dots, y_n$  такі, що система множин  $\{V_k = V(y_k): k = 1, \dots, n\}$  є покриттям простору  $Y$ . Покладемо  $G = U \cap \left(\bigcap_{k=1}^n U(y_k)\right)$ . Ясно, що  $G \neq \emptyset$ , адже  $x_0 \in G$ . Крім того,  $G \subseteq \overline{E}$ , бо  $G \subseteq U \subseteq \overline{E}$ . Покажемо, що  $\omega_f(G \times N) < \beta$ . Візьмемо точки  $(a, b), (u, v) \in G \times N$ . Оскільки  $G \subseteq \overline{E}$ , то існує точка  $x_1 \in E \cap G$ . Далі існують номери  $m$  та  $l$  такі, що  $b \in V_m$  та  $v \in V_l$ . Тоді  $\{b, v\} \subseteq Y = \bigcup_{k=1}^n V_k$ , тому

$$d(f(a, b), f(u, v)) \leq d(f(a, b), f(x_1, b)) + d(f(x_1, b), f(x_1, v)) + d(f(x_1, v), f(u, v)) < \\ < \frac{\beta - \alpha}{4} + \alpha + \frac{\beta - \alpha}{4} = \alpha + \frac{\beta - \alpha}{2} = \frac{\alpha + \beta}{2}.$$

Отже,  $\omega_f(G \times N) \leq (\alpha + \beta)/2 < \beta$ , тобто  $\text{diam}(F_N(G)) < \beta$ , це і означає, що відображення  $F_N$  задовольняє властивість (A).

З теореми 2 і наслідку 2 одержуємо такий результат.

**Теорема 3.** *Нехай  $X$  – берівський простір,  $Y$  – компактний простір, який задовольняє другу аксіому зліченності,  $\mathcal{V}$  – база простору  $Y$ ,  $Z$  – метричний простір. Тоді для того щоб функція  $f: X \times Y \rightarrow Z$  задовольняла властивість Гана, необхідно і достатньо, щоб для кожної множини  $V \in \mathcal{V}$  відображення  $F_V$  задовольняло умову (A) та було категорно кліковим знизу і множина  $\{x \in X: C(f^x) \subseteq V\}$  була залишковою в  $X$ .*

1. Calbrix J., Troallic J. P. Applications séparément continues // C. r. Acad. Sci. Paris. Sér. A. – 1979. – 288. – P. 647–648.
2. Маслоченко В. К. Простори Гана і задача Діні // Мат. методи і фіз.-мех. поля. – 1998. – 41, № 4. – С. 39–45.
3. Маслоченко В. К., Нестеренко В. В. Сукупна неперервність та квазінеперервність горизонтально квазінеперервних функцій // Укр. мат. журн. – 2000. – 52, № 12. – С. 1711–1714.
4. Маслоченко В. К., Нестеренко В. В. Точки сукупної неперервності та великі коливання // Укр. мат. журн. – 2010. – 62, № 6. – С. 791–800.
5. Bouziad A., Troallic J. P. Lower quasicontinuity, joint continuity and related concepts // Topol. Appl. – 2010. – 157, No 18. – P. 2889–2894.
6. Нестеренко В. В. Слабка горизонтальна квазінеперервність // Мат. вісн. НТШ. – 2008. – 5. – С. 177–182.
7. Маслоченко В. К., Нестеренко В. В. Про нове узагальнення теореми Калбрі–Троалліка // Всеукр. конф. “Сучасні проблеми теорії ймовірностей та математичного аналізу”, 25 лютого – 3 березня, 2013: Тези доп. – Івано-Франківськ, 2013. – С. 65–66.
8. Нестеренко В. В. Характеризація властивості Гана // Всеукр. конф. “Сучасні проблеми теорії ймовірностей та математичного аналізу”, 20–26 лютого, 2012: Тези доп. – Ворохта, 2012. – С. 45–46.

Чернівецький національний університет  
ім. Юрія Федьковича

Надійшло до редакції 13.08.2013

**В. В. Нестеренко**

### Характеризація свойства Гана

*Доказано новое обобщение теоремы Калбри–Троаллика и для бэровского пространства  $X$ , метризуемого компакта  $Y$  и метрического пространства  $Z$  найдены необходимые и достаточные условия на отображение  $f: X \times Y \rightarrow Z$ , чтобы для него множество точек  $x \in X$  таких, что  $f$  совокупно непрерывное в каждой точке множества  $\{x\} \times Y$ , было остаточным в  $X$ .*

**V. V. Nesterenko**

### A characterization of the Hahn property

*We prove a new generalization of the Calbrix–Troallic theorem. For a Baire space  $X$ , a metrizable compact  $Y$ , and a metric space  $Z$ , the necessary and sufficient conditions for a mapping  $f: X \times Y \rightarrow Z$ , for which a set of points  $x$  of  $X$  such that  $f$  is jointly continuous at each point of the set  $\{x\} \times Y$  is residual in  $X$ , are found.*



УДК 517.977

А. А. Белоусов

## О дифференциальных играх с геометрическими и интегральными ограничениями

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины А. А. Чикрием)

*Рассматривается задача о сближении траектории линейного конфликтно управляемого процесса с линейным подпространством в случае общих выпуклых интегральных ограничений на управления игроков. С использованием техники многозначных отображений и выпуклого анализа (надграфик функции, рецессивный конус) получены достаточные условия разрешимости задачи в классе измеримых управлений. Показано, как исследовать игры с геометрическими ограничениями с помощью разработанного метода.*

Одним из самых эффективных подходов к исследованию игровых задач динамики в случае геометрических ограничений на управления игроков является первый прямой метод Л. С. Понтрягина [1]. Этот метод был развит в работах М. С. Никольского [2–4] для интегральных ограничений на управления. В этом же направлении проводили свои исследования А. В. Мезенцев, Н. Л. Григоренко, А. Я. Азимов и Ф. В. Гусейнов. Правило экстремального прицеливания Н. Н. Красовского нашло свое воплощение для случая интегральных ограничений в работах В. Н. Ушакова, Б. Н. Пшеничного и Ю. Н. Онопчука. Но эти исследования сосредоточивались главным образом на одном типе интегральных ограничений на управления игроков, а именно, функций-управлений из гильбертова пространства  $L_2$ . Однако интерес представляют и более общие типы интегральных ограничений. В этом направлении следует отметить, в первую очередь, статью М. С. Никольского [3], в которой игра обобщается на случай управления преследователя из пространства Орлича.

В настоящей работе рассматривается линейная дифференциальная игра с интегральным ограничением на управление преследователя, задаваемое выпуклым функционалом самого общего вида. В частности, это могут быть характеристические функции геометрических и смешанных ограничений. Таким образом, игры с геометрическими и смешанными ограничениями оказываются частным случаем игр с интегральными ограничениями и могут быть изучены методами, изложенными в данной работе.

В основе исследования лежит метод разрешающих функций [5], являющийся идейно близким к первому прямому методу Л. С. Понтрягина. Сущность метода состоит в оценке

---

© А. А. Белоусов, 2014

действий преследователя с помощью некоторой скалярной (разрешающей) функции, которая строится по функционалу Минковского вспомогательного многозначного отображения и интеграл от которой определяет гарантированное время сближения. Выяснилось, что возможность построения измеримой разрешающей функции для заданного начального состояния в некий момент времени определяется рецессивным конусом [6] надграфика, ограничивающего управление функционала. Если же для заданных начального состояния и момента времени это условие нарушается, то оказывается [7], что игра может быть закончена в этот момент, но уже не в классе измеримых управлений, а в классе импульсных управлений.

**Постановка задачи.** Динамика игры задается линейным дифференциальным уравнением

$$\dot{z} = Az + Bu - Cv, \quad z(0) = z^0, \quad z \in \mathbb{R}^n, \quad u \in \mathbb{R}^m, \quad v \in \mathbb{R}^l. \quad (1)$$

Управления игрока-преследователя  $u(\cdot)$  и убегающего игрока  $v(\cdot)$  являются измеримыми (по Лебегу) функциями, которые удовлетворяют интегральным ограничениям:

$$\int_0^\infty \varphi(u(\tau)) d\tau \leq 1, \quad \int_0^\infty \psi(v(\tau)) d\tau \leq 1. \quad (2)$$

Эти управления будем называть допустимыми.

Функция  $\varphi$ ,  $\varphi: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ , предполагается неотрицательной, выпуклой и полунепрерывной снизу [6]. Обозначим множество уровня функции  $\varphi$  через  $\Phi(\gamma)$ ,  $\Phi(\gamma) = \{u \in \mathbb{R}^m: \varphi(u) \leq \gamma\}$ . Полагаем, что  $\varphi(0) = 0$  и множество уровня  $\Phi(\gamma)$  ограничено хотя бы для одного  $\gamma$ ,  $\gamma \geq 0$ .

Функция  $\psi$ ,  $\psi: V \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $V \subset \mathbb{R}^l$ , предполагается неотрицательной и полунепрерывной сверху на своей области определения  $V$ .

Терминальное множество  $M$  является линейным подпространством  $\mathbb{R}^n$ . Обозначим через  $\pi$  оператор проектирования из  $\mathbb{R}^n$  на ортогональное дополнение  $L$  к  $M$ .

**Определение.** Будем говорить, что игра может быть закончена в момент  $T = T(z^0)$ , если для любого допустимого управления убегающего игрока  $v(t)$  существует допустимое управление преследователя  $u(t)$ , которое гарантирует приведение решения уравнения (1)  $z(t)$ , соответствующего управлениям  $(u(t), v(t))$  и начальному положению  $z^0$ , на терминальное множество в момент  $T$ :  $z(T) \in M$ . Считаем, что при построении своего управления  $u(t)$  преследователь в момент  $t$  может использовать информацию о реализовавшемся до этого момента управлении противника  $v(\tau)$ ,  $\tau \in [0, t]$ .

Введем предположение на параметры игры, которое можно назвать аналогом условия Л. С. Понтрягина [1] для дифференциальных игр с интегральными ограничениями.

**Условие.** Существует такое число  $\lambda$ ,  $0 \leq \lambda < 1$ , что для всех  $t$ ,  $t \geq 0$ , и  $v$ ,  $v \in V$ , выполняется включение

$$\pi e^{At} Cv \in \pi e^{At} B\Phi(\lambda\psi(v)). \quad (3)$$

**Вспомогательные утверждения.** Зафиксируем начальную позицию  $z^0$ . Введем обозначения

$$f(t, \tau, v, \gamma) = -\gamma \pi e^{At} z^0 + \pi e^{A\tau} Cv, \\ F(\tau, v, \gamma) = \pi e^{A\tau} B\Phi((1-\lambda)\gamma + \lambda\psi(v)),$$

где  $(t, \tau, v, \gamma) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+ \times V \times \mathbb{R}_+$ ,  $\mathbb{R}_+ = [0, \infty)$ .

Рассмотрим вспомогательную функцию, которую можно назвать разрешающей функцией дифференциальной игры с интегральными ограничениями [5], и исследуем свойства этой функции:

$$\gamma(t, \tau, v) = \sup \Omega(t, \tau, v), \quad \Omega(t, \tau, v) = \{\gamma \geq 0: f(t, \tau, v, \gamma) \in F(\tau, v, \gamma)\}. \quad (4)$$

Свойство  $\gamma \in \Omega(t, \tau, v)$  эквивалентно включению

$$a(t)\gamma + b(\tau, v) \in H(\tau) \text{ ері } \varphi, \quad (5)$$

$$H(\tau) = \begin{pmatrix} \pi e^{A\tau} B & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad a(t) = \begin{pmatrix} -\pi e^{At} z^0 \\ 1 - \lambda \end{pmatrix}, \quad b(\tau, v) = \begin{pmatrix} \pi e^{A\tau} C v \\ \lambda \psi(v) \end{pmatrix},$$

где  $\text{ері } \varphi = \{(u, \mu) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}: \mu \geq \varphi(u)\}$  — надграфик функции  $\varphi$ , отображение  $H(\tau): \mathbb{R}^m \times \mathbb{R} \rightarrow L \times \mathbb{R}$ . Предположение (3) означает, что включение (5) выполняется при  $\gamma = 0$ .

Напомним [6], что рецессивным конусом  $0^+W$  выпуклого множества  $W$ ,  $W \subset \mathbb{R}^k$ , называется множество всех векторов  $a$ ,  $a \in \mathbb{R}^k$ , для которых выполняется включение  $a\gamma + b \in W$  для всех неотрицательных чисел  $\gamma$  и векторов  $b$ ,  $b \in W$ . Приведенное определение эквивалентно следующему:  $0^+W = \{a \in \mathbb{R}^k: a + W \subset W\}$ .

При сделанных предположениях о свойствах функции  $\varphi$  надграфик  $\text{ері } \varphi$  будет выпуклым и замкнутым подмножеством  $\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}$ , а рецессивный конус  $0^+ \text{ері } \varphi$  — выпуклым замкнутым конусом [6]. Введем множество

$$\Delta = \{(t, \tau) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+: a(t) \notin H(\tau) \cdot 0^+ \text{ері } \varphi\}.$$

**Лемма 1.** *Множество уровня  $\Phi(\gamma)$ ,  $\gamma \geq 0$ , является полунепрерывным сверху выпуклозначным и компактозначным многозначным отображением.*

**Доказательство.** Выпуклость и компактность множества уровня  $\Phi(\gamma)$ ,  $\gamma \geq 0$ , являются следствием полунепрерывности снизу выпуклой функции  $\varphi$  и ограниченности множества  $\Phi(\gamma)$  для какого-либо числа  $\gamma$  [6].

Отметим, что множества уровня образуют возрастающую по включению совокупность компактных множеств  $\Phi(\gamma) \subset \Phi(\gamma + \delta)$  для всех неотрицательных  $\gamma$  и  $\delta$ . График отображения  $\Phi(\cdot)$  совпадает с  $\text{ері } \varphi$  и является замкнутым множеством. Из результатов [8, § 3.1, теорема 8] следует полунепрерывность сверху отображения  $\Phi(\gamma)$ .

**Лемма 2.** *Для всех  $(t, \tau, v) \in \Delta \times V$  функция  $\gamma(t, \tau, v)$  конечна и верхняя грань в определении  $\gamma(t, \tau, v)$  (4) достигается.*

**Доказательство.** Множество  $\text{ері } \varphi$  — выпукло и замкнуто, поэтому выпуклым будет множество  $H(\tau) \text{ері } \varphi$ . Покажем, что это множество также замкнуто, для чего сопоставим равенства  $\ker H(\tau) = \ker(\pi e^{A\tau} B) \times 0 \subset \mathbb{R}^m \times 0$  и  $0^+ \text{ері } \varphi \cap \{\mathbb{R}^m \times 0\} = 0 \times 0 \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}$ , откуда получаем, что  $\ker H(\tau) \cap 0^+ \text{ері } \varphi = 0 \times 0 \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}$ , а значит [6, теорема 9.1], множество  $H(\tau) \text{ері } \varphi$  — замкнуто и  $0^+ \{H(\tau) \text{ері } \varphi\} = H(\tau) \cdot 0^+ \text{ері } \varphi$ .

Из условий леммы и включения (5) следует, что  $a(t) \notin 0^+ \{H(\tau) \text{ері } \varphi\}$  и поэтому  $\gamma(t, \tau, v) < \infty$ .

Множество  $\Omega(t, \tau, v)$  определяется (5) пересечением замкнутого луча в направлении  $a(t)$  и выпуклого замкнутого множества  $H(\tau) \text{ері } \varphi$ . Поэтому  $\Omega(t, \tau, v)$  является выпуклым замкнутым множеством, а значит, верхняя грань в определении  $\gamma(t, \tau, v)$  достигается.

**Лемма 3.** *Для всех  $(t, \tau, v) \in \Delta \times V$  функция  $\gamma(t, \tau, v)$  полунепрерывна сверху по совокупности переменных.*



**Доказательство.** Возьмем произвольный вектор  $(\bar{t}, \bar{\tau}, \bar{v}) \in \Delta \times V$  и зафиксируем его. Положим  $\bar{\gamma} = \gamma(\bar{t}, \bar{\tau}, \bar{v}) < \infty$ . По определению величины  $\bar{\gamma}$  (4) для любого положительного числа  $\varepsilon$  вектор  $f(\bar{t}, \bar{\tau}, \bar{v}, \bar{\gamma} + \varepsilon)$  лежит вне выпуклого компакта  $F(\bar{t}, \bar{v}, \bar{\gamma} + \varepsilon)$ .

Из леммы 1 и полунепрерывности сверху функции  $\psi(v)$  следует, что  $F(\tau, v, \gamma), (\tau, v, \gamma) \in \mathbb{R}_+ \times V \times \mathbb{R}_+$ , является полунепрерывным сверху выпуклозначным и компактозначным многозначным отображением. Вектор  $f(t, \tau, v, \gamma)$  зависит от аргумента  $(t, \tau, v, \gamma) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+ \times V \times \mathbb{R}_+$  непрерывным образом. Значит, существуют достаточно малые окрестности  $O_1$  вектора  $(\bar{t}, \bar{v})$  в множестве  $\mathbb{R}_+ \times V$  и  $O_2$  вектора  $(\bar{t}, \bar{\tau}, \bar{v})$  в  $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+ \times V$  такие, что для всех  $(t, \tau, v)$  из окрестности  $\{\mathbb{R}_+ \times O_1\} \cap O_2$  вектор  $f(t, \tau, v, \bar{\gamma} + \varepsilon)$  лежит вне выпуклого компакта  $F(\tau, v, \bar{\gamma} + \varepsilon)$  и, следовательно,  $\gamma(t, \tau, v) \leq \gamma(\bar{t}, \bar{\tau}, \bar{v}) + \varepsilon$ , что и завершает доказательство леммы.

**Основная теорема.** Сформулируем теперь достаточные условия гарантированного приведения решения уравнения (1), (2) на терминальное множество  $M$  из начального положения  $z^0$ .

**Теорема.** *Полагаем, что выполнено условие (3) на параметры игры (1), (2). Предположим, что существует момент  $T = T(z^0)$  такой, что  $\{T\} \times [0, T] \subset \Delta$  и для всех допустимых управлений  $v(\cdot)$  выполняется неравенство*

$$\int_0^T \gamma(T, T - \tau, v(\tau)) d\tau \geq 1. \quad (6)$$

Тогда дифференциальная игра может быть закончена в момент  $T$ .

**Доказательство.** Зафиксируем момент  $T$ , удовлетворяющий предположениям теоремы.

Согласно лемме 3, разрешающая функция  $\gamma(T, \tau, v)$  является измеримой по Борелю по совокупности переменных  $(\tau, v), (\tau, v) \in [0, T] \times V$ , поэтому измеримым по Борелю будет и вектор  $f(T, \tau, v, \gamma(T, \tau, v))$ . Из полунепрерывности сверху функции  $\psi(v)$ , лемм 1 и 3 следует, что полунепрерывным сверху по  $(\tau, v) \in [0, T] \times V$  будет выпуклозначное и компактозначное отображение  $G(\tau, v) = \Phi((1 - \lambda)\gamma(T, \tau, v) + \lambda\psi(v))$ . Значит, это многозначное отображение будет измеримым по Борелю по совокупности переменных  $(\tau, v)$  и выполняется включение (4):

$$f(T, \tau, v, \gamma(T, \tau, v)) \in \pi e^{A\tau} B G(\tau, v), \quad (\tau, v) \in [0, T] \times V. \quad (7)$$

Из теоремы об измеримом селекторе Куратовского и Рыль-Нардзевского [9, теорема 3.12] следует, что у включения (7) существует измеримый по Борелю по совокупности переменных  $(\tau, v), (\tau, v) \in [0, T] \times V$ , селектор  $w(\tau, v) \in G(\tau, v)$ . Из этой же теоремы можно заключить, что существует измеримый по Борелю селектор  $\tilde{w}(\tau, v) \in \Phi(\lambda\psi(v))$ , для которого выполняется равенство  $f(T, \tau, v, 0) = \pi e^{A\tau} B \tilde{w}(\tau, v)$  при всех  $(\tau, v) \in \mathbb{R}_+ \times V$ .

Предположим, что убегающий игрок использует на интервале  $[0, T]$  произвольное допустимое (2) управление  $v(\tau)$ . По предположению теоремы (6) существует такой момент  $T^* = T^*(z^0, v(\cdot))$ , что

$$\int_0^{T^*} \gamma(T, T - \tau, v(\tau)) d\tau = 1.$$

Тогда управление игрока-преследователя на интервале  $[0, T]$  положим равным

$$u(\tau) = \begin{cases} w(T - \tau, v) & \text{при } \tau \in [0, T^*), \\ \tilde{w}(T - \tau, v) & \text{при } \tau \in [T^*, T]. \end{cases} \quad (8)$$

Такой закон выбора управлений преследователя является (по существу) контруправлением с одним переключением.

Отметим, что суперпозиция борелевской и измеримой по Лебегу функций будет измеримой по Лебегу функцией. Поэтому построенное таким образом (8) управление  $u(\tau)$  — измеримо по Лебегу для произвольного измеримого управления  $v(\tau)$ .

Покажем, что при таком выборе управления преследователя решение (1) попадет на терминальное множество в момент  $T$ :

$$\begin{aligned} \pi z(T) &= \pi e^{AT} z^0 + \int_0^T \pi e^{A(T-\tau)} [Bu(\tau) - Cv(\tau)] d\tau = \pi e^{AT} z^0 + \\ &+ \int_0^{T^*} \pi e^{A(T-\tau)} [Bw(T-\tau, v(\tau)) - Cv(\tau)] d\tau + \int_{T^*}^T \pi e^{A(T-\tau)} [B\tilde{w}(T-\tau, v(\tau)) - Cv(\tau)] d\tau = \\ &= \pi e^{AT} z^0 - \int_0^{T^*} \gamma(T, T - \tau, v(\tau)) d\tau \pi e^{AT} z^0 = 0. \end{aligned}$$

Это равенство и доказывает приведение решения на терминальное множество  $z(T) \in M$ .

Проверим, что построенное таким образом (8) управление  $u(\tau)$  удовлетворяет интегральному ограничению (2)

$$\begin{aligned} \int_0^T \varphi(u(\tau)) d\tau &= \int_0^{T^*} \varphi(w(T - \tau, v(\tau))) d\tau + \int_{T^*}^T \varphi(\tilde{w}(T - \tau, v(\tau))) d\tau \leq \\ &\leq (1 - \lambda) \int_0^{T^*} \gamma(T, T - \tau, v(\tau)) d\tau + \lambda \int_0^T \psi(v(\tau)) d\tau \leq 1. \end{aligned}$$

Следовательно, теорема доказана.

*Замечание.* Несложно показать, что предположение  $\{T\} \times [0, T] \subset \Delta$  из формулировки теоремы нарушается только при выполнении условия

$$-\pi e^{AT} z^0 \in \bigcup_{0 \leq t \leq T} \pi e^{At} B\Phi(1 - \lambda). \quad (9)$$

В работе [7] показано, что при выполнении условий (9) и (3) игра (1), (2) может быть закончена в момент  $T$  в классе импульсных контруправлений. Таким образом, указанное предположение носит больше технический характер и обеспечивает конечность разрешающей функции (4).

Отметим также, что если функция  $\varphi$  является кофинитной [6], т. е. надграфик ерї  $\varphi$  не содержит невертикальных лучей, то указанное предположение теоремы выполняется для всех  $T$  и  $z^0$  таких, что  $\pi e^{AT} z^0 \neq 0$ .

**Случай геометрических ограничений.** Покажем, что геометрические ограничения на управления игроков в линейной дифференциальной игре с помощью перехода к характеристическим функциям могут быть приведены к интегральным ограничениям.

Пусть динамика игры задается линейным дифференциальным уравнением (1). Управление игрока-преследователя  $u(\cdot)$  и убегающего игрока  $v(\cdot)$  являются измеримыми (по Лебегу) функциями, которые удовлетворяют геометрическим ограничениям  $u \in U$  и  $v \in V$ , где  $U$  и  $V$  — выпуклые компакты в соответствующих конечномерных пространствах. Терминальное множество  $M$  является линейным подпространством  $\mathbb{R}^n$ .

Введем функции

$$\varphi(u) = \begin{cases} 0, & u \in U, \\ \infty, & u \notin U, \end{cases} \quad \psi(v) \equiv 0, \quad v \in V,$$

и рассмотрим вместо геометрических ограничений интегральные ограничения вида (2). Указанные функции удовлетворяют предположениям относительно функций ограничений, если  $0 \in U$ . Очевидно, что выпуклая функция  $\varphi$  является кофинитной и  $\Phi(\gamma) = U$  для всех  $\gamma \geq 0$ .

Тогда предположение (3) примет вид:

$$\pi e^{At} C v \in \pi e^{At} B U, \quad \text{для всех } t \text{ и } v, \quad t \geq 0, \quad v \in V.$$

В таком виде предположение (3) совпадает с классическим условием Л. С. Понтрягина [1, 5] для дифференциальных игр с геометрическими ограничениями. Условия теоремы (6) совпадают с достаточными условиями завершения игры для геометрических ограничений, которые формулируются в первом прямом методе Л. С. Понтрягина [1] и методе разрешающих функций [5], где разрешающая функция (4) принимает вид

$$\gamma(t, \tau, v) = \sup\{\gamma \geq 0 : -\gamma \pi e^{At} z^0 + \pi e^{A\tau} C v \in \pi e^{A\tau} B U\}.$$

Таким образом, игры с геометрическими ограничениями являются частным случаем игр с интегральными ограничениями и могут быть изучены методами, изложенными в данной работе.

*Работа выполнена при поддержке ГФФИ Украины (проект Ф53.1/006).*

1. Понтрягин Л. С. Избранные научные труды. Т. 2. — Москва: Наука, 1988. — 576 с.
2. Никольский М. С. Прямой метод в линейных дифференциальных играх с интегральными ограничениями // Управляемые системы. Вып. 2. — Новосибирск: Изд-во СО АН СССР, 1969. — С. 49–58.
3. Никольский М. С. Прямой метод в линейных дифференциальных играх с общими интегральными ограничениями // Диф. уравнения. — 1972. — 8, № 6. — С. 964–971.
4. Никольский М. С. Линейные дифференциальные игры преследования с интегральными ограничениями // Там же. — 1992. — 28, № 2. — С. 219–223.
5. Чикрий А. А. Конфликтно управляемые процессы. — Киев: Наук. думка, 1992. — 384 с.
6. Рокафеллар Р. Выпуклый анализ. — Москва: Мир, 1973. — 470 с.
7. Белоусов А. А. Импульсные управления в дифференциальных играх с интегральными ограничениями // Теорія оптимальних рішень. — Київ: Ін-т кібернетики ім. В. М. Глушкова НАН України, 2013. — С. 50–55.

8. Обен Ж. П., Экланд И. Прикладной нелинейный анализ. – Москва: Мир, 1988. – 512 с.
9. Kisielewicz M. Differential inclusions and optimal control // Mathematics and Its Applications. – Dordrecht: Kluwer, 1991. – 44. – 260 p.

Институт кибернетики им. В. М. Глушкова  
НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 22.07.2013

**О. А. Белоусов**

### **Про диференціальні ігри з геометричними та інтегральними обмеженнями**

*Розглядається задача про зближення траєкторії лінійного конфліктно керованого процесу з лінійним підпростором у випадку загальних опуклих інтегральних обмежень на управління гравців. З використанням техніки багатозначних відображень і опуклого аналізу (надграфік функції, рецесивний конус) отримано достатні умови розв'язності задачі в класі вимірних керувань. Показано, як досліджувати ігри з геометричними обмеженнями за допомогою розробленого методу.*

**A. A. Belousov**

### **On differential games with geometric and integral constraints**

*The paper deals with the problem of bringing a trajectory of the linear conflict-controlled process to a linear subspace in the case of general convex integral constraints on the players' controls. Sufficient conditions for the problem solvability in the class of measurable controls are obtained. In so doing, the technique of set-valued mappings and convex analysis (epigraph of a function, recession cone) is used. It is shown how to investigate the game with geometric constraints by the developed method.*

## Лінійно-квадратична задача оптимального керування процесом теплопровідності

(Представлено членом-кореспондентом НАН України А. О. Чикрієм)

*Розглядається проблема мінімізації квадратичного функціонала на розв'язках другої крайової задачі для рівняння теплопровідності. Для дослідження сформульованої задачі оптимізації застосовано метод множників Лагранжа. Такий підхід дав можливість отримати необхідні умови оптимальності. На основі цих умов виведено інтегро-диференціальне рівняння Ріккати з частинними похідними. Розв'язок цього рівняння подано в замкненій формі.*

В теорії оптимального керування важливе місце займає лінійно-квадратична задача. Під цим терміном розуміється задача мінімізації квадратичного функціонала на множині розв'язків деякої системи лінійних диференціальних рівнянь, праві частини яких певним чином залежать від одного або декількох параметрів (керувань). Якщо поведінка керованого об'єкта описується системою звичайних диференціальних рівнянь, то мова йде про системи із зосередженими параметрами. У випадку диференціальних рівнянь з частинними похідними маємо систему із розподіленими параметрами. Для систем із зосередженими параметрами лінійно-квадратична задача досліджена досить повно. Основним результатом цього дослідження є матричне диференціальне рівняння Ріккати [1–3, 5]. Для математичних моделей систем із розподіленими параметрами виникають інтегро-диференціальні рівняння Ріккати з частинними похідними, які менше досліджені порівняно із звичайними матричними диференціальними рівняннями Ріккати. В даній роботі для сформульованої задачі оптимізації отримано інтегро-диференціальне рівняння Ріккати з частинними похідними, розв'язок якого наведено в замкненій формі.

**Постановка задачі.** Розглядається процес, що описується таким рівнянням теплопровідності:

$$\frac{\partial z(t, x)}{\partial t} = \frac{\partial^2 z(t, x)}{\partial x^2} + u(t, x), \quad (1)$$

$$t_0 \leq t \leq t_1, \quad 0 \leq x \leq l.$$

Для рівняння (1) задано початкову умову

$$z(t_0, x) = f(x) \quad (2)$$

та крайові умови

$$\frac{\partial z(t, 0)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial z(t, l)}{\partial x} = 0, \quad (3)$$

де через  $\partial z(t, 0)/\partial x$  та  $\partial z(t, l)/\partial x$  позначено значення  $\partial z(t, x)/\partial x$  при  $x = 0$  та  $x = l$  відповідно, дійсні числа  $t_0 \geq 0$ ,  $t_1 > t_0$ ,  $l > 0$  і функція  $f(x) \in L_2(0, l)$  задані. Функція

$u(t, x)$  вважається допустимим керуванням, якщо  $u(t, x) \in L_2(\Omega)$ , де множину  $\Omega$  задано так:  $\Omega = \{(t, x) : t \in [t_0, t_1], x \in [0, l]\}$ . Для фіксованого допустимого керування  $u(t, x)$  розв'язком  $z(t, x)$  задачі (1)–(3) вважається узагальнений розв'язок  $z(t, x) \in L_2(\Omega)$ . Далі розглянемо такий критерій оптимальності:

$$I(u, z) = \frac{1}{2} \int_0^l z^2(t_1, x) dx + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_1} \int_0^l [z^2(t, x) + u^2(t, x)] dx dt. \quad (4)$$

Задача оптимального керування процесом, що описується співвідношеннями (1)–(3), полягає в знаходженні такого керування  $u(t, x)$ , на якому функціонал (4) набуває найменшого значення. Якщо таке керування існує, то воно називається *оптимальним керуванням*.

**Необхідні умови оптимальності.** Для знаходження розв'язку розглянутої вище задачі застосуємо метод множників Лагранжа [4, с. 31]. Суть методу полягає в тому, що замість функціонала (4) розглядаємо такий функціонал:

$$J(p, u, z) = \frac{1}{2} \int_0^l z^2(t_1, x) dx + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_1} \int_0^l [z(t, x)^2 + u^2(t, x)] dx dt + \\ + \int_{t_0}^{t_1} \int_0^l p(t, x) \left[ \frac{\partial^2 z(t, x)}{\partial x^2} + u(t, x) - \frac{\partial z(t, x)}{\partial t} \right] dx dt, \quad (5)$$

де  $p(t, x)$  — невідома функція (множник Лагранжа). Очевидно, що при виконанні співвідношення (1) значення функціоналів (4) і (5) збігаються. В такий спосіб задача на умовний екстремум для функціонала (4) зводиться до задачі на екстремум для функціонала (5) із урахуванням співвідношень (2), (3). Далі знаходимо вираз для приросту  $\Delta J$  функціонала (5)

$$\Delta J = J(p + \varepsilon \delta p, u + \varepsilon \delta u, z + \varepsilon \delta z) - J(p, u, z). \quad (6)$$

Після очевидних спрощень (розкриття дужок, інтегрування частинами та зведення подібних членів) співвідношення (6) матиме вигляд

$$\Delta J = \varepsilon \int_0^l [z(t_1, x) - p(t_1, x)] \delta z(t_1, x) dx + \\ + \varepsilon \int_{t_0}^{t_1} \int_0^l \left[ \left[ z(t, x) + \frac{\partial^2 p(t, x)}{\partial x^2} + \frac{\partial p(t, x)}{\partial t} \right] \delta z(t, x) + [u(t, x) + p(t, x)] \delta u(t, x) \right] dx dt + \\ + \varepsilon \int_{t_0}^{t_1} \int_0^l \delta p(t, x) \left[ \frac{\partial^2 z(t, x)}{\partial x^2} + u(t, x) - \frac{\partial z(t, x)}{\partial t} \right] dx dt + \\ + \frac{\varepsilon^2}{2} \left[ \int_0^l [\delta z(t_1, x)]^2 dx + \int_{t_0}^{t_1} \int_0^l [[\delta z(t, x)]^2 + [\delta u(t, x)]^2] dx dt \right]. \quad (7)$$

На підставі рівності (7) можна сформулювати таке твердження.

**Теорема 1.** *Оптимальне керування  $u(t, x)$  в задачі (1)–(4) єдине і визначається із співвідношень*

$$\frac{\partial z(t, x)}{\partial t} = \frac{\partial^2 z(t, x)}{\partial x^2} + u(t, x), \quad (8a)$$

$$z(t_0, x) = f(x), \quad \frac{\partial z(t, 0)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial z(t, l)}{\partial x} = 0, \quad (8б)$$

$$\frac{\partial p(t, x)}{\partial t} = -\frac{\partial^2 p(t, x)}{\partial x^2} - z(t, x), \quad (8в)$$

$$p(t_1, x) = z(t_1, x), \quad \frac{\partial p(t, 0)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial p(t, l)}{\partial x} = 0, \quad (8г)$$

$$u(t, x) + p(t, x) = 0. \quad (8д)$$

**Виведення інтегро-диференціального рівняння Ріккати.** Нехай існує залежність  $p(t, x) = \int_0^l R(t, x, s)z(t, s) ds$  між функціями  $p(t, x)$  і  $z(t, x)$ , які задовольняють систему співвідношень (8а)–(8д). Легко переконатися в тому, що відносно функції  $R(t, x, s)$  має місце таке твердження.

**Теорема 2.** *Функція  $R(t, x, s)$  є розв'язком інтегро-диференціального рівняння*

$$\frac{\partial R(t, x, s)}{\partial t} + \frac{\partial^2 R(t, x, s)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 R(t, x, s)}{\partial s^2} - \int_0^l R(t, x, \lambda)R(t, \lambda, s)d\lambda + \delta(x - s) = 0, \quad (9)$$

де  $\delta(x)$  – дельта-функція Дірака, та задовольняє такі додаткові умови:

$$R(t_1, x, s) = \delta(x - s), \quad (10a)$$

$$\frac{\partial R(t, 0, s)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial R(t, l, s)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial R(t, x, 0)}{\partial s} = 0, \quad \frac{\partial R(t, x, l)}{\partial s} = 0. \quad (10б)$$

**Побудова розв'язку інтегро-диференціального рівняння Ріккати.** Розв'язок  $R(t, x, s)$  рівняння (9) шукаємо у вигляді

$$R(t, x, s) = \frac{1}{l} \left[ r_0(t) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} r_n(t) \cos \frac{\pi n x}{l} \cos \frac{\pi n s}{l} \right], \quad (11)$$

де функції  $r_n(t)$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ , потрібно знайти. Очевидно, що функція (11) задовольняє умови (10б). Безпосередньо із рівності (11) знаходимо

$$\frac{\partial R(t, x, s)}{\partial t} = \frac{1}{l} \left[ \frac{dr_0(t)}{dt} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{dr_n(t)}{dt} \cos \frac{\pi n x}{l} \cos \frac{\pi n s}{l} \right], \quad (12)$$

$$\frac{\partial^2 R(t, x, s)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 R(t, x, s)}{\partial s^2} = -\frac{2}{l} \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \frac{\pi n}{l} \right]^2 r_n(t) \cos \frac{\pi n x}{l} \cos \frac{\pi n s}{l}, \quad (13)$$

$$\int_0^l R(t, x, \lambda) R(t, \lambda, s) d\lambda = \frac{1}{l} \left[ r_0^2(t) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} r_n^2(t) \cos \frac{\pi n x}{l} \cos \frac{\pi n s}{l} \right]. \quad (14)$$

Підставляючи вирази (12)–(14) в рівняння (9), отримаємо для знаходження коефіцієнтів  $r_n(t) = 1$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ , таку нескінченну систему скалярних рівнянь Ріккати:

$$\frac{dr_n(t)}{dt} - 2 \left[ \frac{\pi n}{l} \right]^2 r_n(t) - r_n^2(t) + 1 = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (15)$$

При цьому умова (10a) породжує додаткові умови для системи рівнянь (15)

$$r_n(t_1) = 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (16)$$

Підводячи підсумки, приходимо до такого твердження.

**Теорема 3.** *Функція  $R(t, x, s)$  має вигляд (11), де коефіцієнти  $r_n(t)$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ , є розв'язками системи звичайних диференціальних рівнянь (15) та задовольняють додаткові умови (16).*

Далі, використовуючи спосіб, аналогічний описаному в [3, с. 320], легко знаходимо формули для  $r_n(t)$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ ,

$$r_n(t) = \frac{\lambda_n \cos h(\lambda_n(t_1 - t)) - (\alpha_n - 1) \sin h(\lambda_n(t_1 - t))}{\lambda_n \cos h(\lambda_n(t_1 - t)) + (\alpha_n + 1) \sin h(\lambda_n(t_1 - t))}, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

де  $\alpha_n = \left[ \frac{\pi n}{l} \right]^2$ ,  $\lambda_n = \sqrt{\left[ \frac{\pi n}{l} \right]^4 + 1}$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$

Таким чином, у роботі розглянуто лінійно-квадратичну задачу оптимального керування процесом теплопровідності. За допомогою методу множників Лагранжа отримано необхідні умови оптимальності. Встановлено умови, що забезпечують єдиність оптимального керування. Вперше для такої задачі з використанням дельта-функції Дірака одержано інтегро-диференціальне рівняння Ріккати. Запропоновано формулу для обчислення розв'язку цього рівняння. Використання отриманої формули дає можливість подати оптимальне керування в явній формі. Тема, розглянута у роботі, безумовно, є досить перспективною для подальших досліджень.

1. Жуковський В. И., Чикрий А. А. Линейно-квадратичные дифференциальные игры. – Киев: Наук. думка, 1994. – 320 с.
2. Bensoussan A., Da Prato G., Delfour M. C., Mitter S. K. Representation and control of infinite dimensional systems. – Boston; Basel; Berlin: Birkhäuser, 2007. – 575 p.
3. Naidu D. S. Optimal control systems. (Electrical engineering textbook series). – Boca Raton: CRC Press, 2003. – 433 p.
4. Сиразетдинов Т. К. Оптимизация систем с распределенными параметрами. – Москва: Наука, 1977. – 480 с.
5. Ройтенберг Я. Н. Автоматическое управление. – Москва: Наука, 1978. – 551 с.



М. М. Копец

### **Линейно-квадратичная задача оптимального управления процессом теплопроводности**

*Рассматривается проблема минимизации квадратичного функционала на решениях второй краевой задачи для уравнения теплопроводности. Для исследования сформулированной задачи оптимизации применен метод множителей Лагранжа. Такой подход дал возможность получить необходимые условия оптимальности. На основе этих условий выведено интегро-дифференциальное уравнение Риккати с частными производными. Решение этого уравнения представлено в замкнутой форме.*

М. М. Копетс

### **A linear-quadratic problem of optimal control over the heat conductivity process**

*The problem of minimization of a quadratic functional on solutions of the second boundary-value problem for the heat equation is considered. The method of Lagrange multipliers is applied to research the formulated optimization problem. Such approach has given a chance to obtain the necessary conditions of optimality. On the basis of these conditions, the integro-differential Riccati equation with partial derivatives is deduced. The solution of this equation is presented in the closed form.*

О. М. Литвин, О. О. Литвин, О. В. Ткаченко, О. Л. Грицай

## Відновлення функцій двох змінних із збереженням класу $C^r(\mathbb{R}^2)$ за допомогою їх слідів та слідів їх похідних до фіксованого порядку на заданій лінії

(Представлено академіком НАН України І. В. Сергієнком)

*Досліджуються методи побудови операторів відновлення диференційованих функцій двох змінних в околі гладкої кривої, які зберігають клас диференційованості  $C^r(\mathbb{R}^2)$ . Метод використовує для побудови вказаних операторів сліди наближуваної функції та її частинних похідних за однією змінною до заданого порядку на вказаній кривій.*

Оператори Тейлора та їх узагальнення, що використовують для своєї побудови значення наближуваної функції та її частинних похідних до заданого порядку  $N \geq 0$  у деякій точці, мають порядок диференційованості, що повністю визначається диференціальними властивостями допоміжних (базисних) функцій (поліномів алгебраїчних, тригонометричних, узагальнених, сплайнів, вейвлетів тощо). Оскільки функції двох і більше змінних можуть бути задані не тільки своїми значеннями та значеннями своїх частинних похідних в окремих точках, але також своїми слідами та слідами деяких диференціальних операторів на заданих лініях, то оператори, що використовують такі сліди, належать до класу диференційованості, який визначається диференціальними властивостями допоміжних (базисних) функцій і вказаних слідів. Нагадаємо, запис  $f(x_1, \dots, x_n) \in C^r(\mathbb{R}^n)$  означає, що сама функція  $f$  і всі її частинні похідні до порядку  $r$ ,  $r \geq 0$ , є неперервними, тобто  $\frac{\partial^{|\beta|}}{\partial x_1^{\beta_1} \dots \partial x_n^{\beta_n}} f \in C(\mathbb{R}^n)$ ,  $0 \leq |\beta| = \beta_1 + \dots + \beta_n \leq r$ . Отже, в цьому означенні нема ніяких обмежень на частинні похідні порядків  $\gamma$ ,  $|\gamma| > r$ , тобто існує вкладення класів функцій  $C^q(\mathbb{R}^n) \subseteq C^r(\mathbb{R}^n)$ ,  $r \leq q < \infty$ . У зв'язку з цим будемо говорити, що оператор  $L$  зберігає клас диференційованості наближуваної функції  $f$ , якщо  $f \in C^r(\mathbb{R}^n) \Rightarrow Lf \in C^r(\mathbb{R}^n)$ . Якщо ж  $f \in C^r(\mathbb{R}^n) \Rightarrow Lf \in C^q(\mathbb{R}^n)$ ,  $q < r$ , то говоритимемо, що оператор  $L$  не зберігає клас диференційованості функції  $f$ .

**Аналіз літературних джерел.** Задача продовження функцій  $n$  змінних з границі області на область або на весь  $n$ -вимірний простір із збереженням потрібних диференціальних властивостей є однією з ключових задач теорії наближення функцій багатьох змінних (див. [1–11]). В роботі [9] наведено формулу

$$u(x, y) = \sum_{s=0}^{m-1} \frac{\partial^s G(x, y)}{\partial y^s} * \phi_s(x) = \sum_{s=0}^{m-1} \frac{1}{\pi(m-1)!} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_s(t) \frac{\partial^s}{\partial y^s} \left[ \frac{y^m}{y^2 + (x-t)^2} \right] dt,$$

$$u \in C^\infty(\mathbb{R}^2),$$

де  $(f * g)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)g(x-t)dt$  — згортка функцій  $f, g$ , яка є розв'язком задачі Коші для ітерованого оператора Лапласа

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)^m u(x, y) = 0, \quad u^{(0,s)}(x, 0) = \phi_s(x), \quad s = \overline{0, m-1}.$$

Функція  $G(x, y) = \frac{y^{m-1}}{\pi(m-1)!} \frac{y}{y^2 + x^2}$  є фундаментальним розв'язком цієї задачі, тобто функцією, що задовольняє рівняння

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)^m G(x, y) = 0$$

та умови Коші

$$G^{(0,k)}(x, 0) = 0, \quad k = \overline{0, m-2}, \quad G^{(0,m-1)}(x, 0) = \delta(x),$$

$$G^{(0,k)}(x, 0) = \left. \frac{\partial^k G(x, y)}{\partial y^k} \right|_{y=0}, \quad k = \overline{0, m-2}.$$

При  $m = 1$  отримуємо формулу Пуассона

$$u(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_0(t) \left[ \frac{y}{y^2 + (x-t)^2} \right] dt,$$

що є розв'язком задачі Коші  $u(x, 0) = \phi_0(x)$ ,  $x \in R$ , для рівняння

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)u(x, y) = 0.$$

У роботах [12, 13] досліджувалися оператори відновлення функцій багатьох змінних за допомогою операторів, що зберігають клас диференційовності  $C^r(R^n)$ , якому належить наближувана функція, і використовують при цьому сліди  $u^{(0,s)}(x, 0) = \phi_s(x) \in C^{r-s}(R)$ ,  $s = \overline{0, m-1}$ ,  $m \leq r$ . Але загальний випадок операторів, що зберігають клас диференційовності в околі довільної кривої, не досліджувався. В той же час з практики відомо приклади, у яких необхідно відновлювати поверхні за відомими слідами їх частинних похідних або деякої системи диференціальних операторів (взагалі кажучи, нелінійних) на заданій кривій. Найбільш відомим прикладом такої задачі є задача побудови системи координатних функцій для варіаційних методів розв'язання крайових задач, що точно задовольняють граничні умови на границі області інтегрування. Якщо область, в якій розв'язується крайова задача, є об'єднанням кількох відомих областей, то границя такої області може мати кутові точки, тобто буде недиференційовною лінією складної форми, що є об'єднанням відрізків кількох відомих ліній. Як приклад також відзначимо необхідність відновлення поверхонь лопаток авіадвигунів або лопаток гвинтів на атомних підводних човнах, форма яких знаходиться з умови найкращого обтікання поверхні газом або рідиною шляхом розв'язання відповідних крайових задач (тобто форма поверхні обтікання є невідомою). Такі задачі є важливою складовою процесу конструювання лопаток. Однією з найскладніших задач, які виникають

при цьому, є збереження відповідної гладкості наближуваної поверхні (тобто належність відповідних функцій до заданого класу диференційовності) та ізогеометрії (опуклості, вгнутості тощо) [10]. Проблеми, що виникають у задачах продовження функцій, досить повно описані в доповненні В. І. Буренкова до роботи І. Стейна [5, с. 231–235]. Загальний метод розв'язання таких задач можна отримати на основі використання узагальнень операторів інтерлінації функцій із збереженням класу диференційовності [12, 13].

**Основні твердження роботи.** В даній роботі пропонуються і досліджуються методи побудови операторів наближення функцій двох змінних із збереженням класу диференційовності, якому належить наближувана функція за умови, що сліди цих операторів і сліди їх частинних похідних за однією із змінних до фіксованого порядку на заданій лінії збігаються із відповідними слідами наближуваної функції.

Вказані оператори планується використати для побудови узагальнених формул інтерлінації функцій двох змінних із збереженням потрібного класу диференційовності та із заданими слідами і слідами частинних похідних до фіксованого порядку на системі неперетинних плоских кривих  $y$  декартової системі координат.

**Оператори відновлення функції двох змінних за допомогою її слідів та слідів її похідних за однією змінною на заданій лінії.** Зауважимо, що поліном Тейлора за однією змінною

$$T_N f(x, y) = \sum_{s=0}^N f^{(0,s)}(x, \gamma(x)) \frac{(y - \gamma(x))^s}{s!}, \quad f^{(0,s)}(x, \gamma(x)) = \left. \frac{\partial^s f(x, y)}{\partial y^s} \right|_{y=\gamma(x)}$$

має властивості

$$\left. \frac{\partial^q T_N f(x, y)}{\partial y^q} \right|_{y=\gamma(x)} = \left. \frac{\partial^q f(x, y)}{\partial y^q} \right|_{y=\gamma(x)}, \quad 0 \leq q \leq N,$$

$$f \in C^r(\mathbb{R}^2) \cap f^{(0,s)} \in C^{r-s}(\mathbb{R}^2) \Rightarrow T_N f \in C^{r-N}(\mathbb{R}^2), \quad 0 \leq s \leq N \leq r.$$

Тобто цей оператор  $T_N f(x, y)$  не зберігає клас диференційовності  $C^r(\mathbb{R}^2)$  функції  $f(x, y)$ . Це твердження, зокрема, виконується для функцій

$$f(x, y) = |x + y - 1|^{2q+1} \in C^{2q}(\mathbb{R}^2), \quad f \notin C^{2q+1}(\mathbb{R}^2),$$

$$f(x, y) = |x + y - 1|^{2q+1}(x + y - 1) \in C^{2q+1}(\mathbb{R}^2), \quad f \notin C^{2q+2}(\mathbb{R}^2).$$

Таким чином, оператори  $T_N f(x, y)$  не можна використовувати замість  $f(x, y)$  без додаткового аналізу у тих задачах, де істотною є вимога, щоб функція  $f(x, y)$  мала неперервні похідні порядку  $r > 0$ . Потрібні оператори такого типу вперше були побудовані в роботах [13–15] для випадку  $\gamma(x) = 0$  в дискретній та інтегральній формах. Зокрема в дискретній формі оператор

$$L_N f(x, y) = \sum_{\ell=0}^N \lambda_{0,\ell} f(x + \beta_{0,\ell} y, 0) + \sum_{s=1}^N \sum_{\ell=0}^N \lambda_{s,\ell} \int_0^{x+\beta_{s,\ell} y} f^{(0,s)}(t, 0) \frac{(x + \beta_{s,\ell} y - t)^{s-1}}{(s-1)!} dt$$

задовольняє такі умови:

$$f \in C^r(\mathbb{R}^2) \cap f^{(0,s)} \in C^{r-s}(\mathbb{R}^2) \Rightarrow L_N f \in C^r(\mathbb{R}^2), \quad 0 \leq s \leq N \leq r,$$

$$\left. \frac{\partial^q L_N f(x, y)}{\partial y^q} \right|_{y=0} = \left. \frac{\partial^q f(x, y)}{\partial y^q} \right|_{y=0}, \quad 0 \leq q \leq N,$$

якщо невідомі  $\lambda_{s,\ell}$ ,  $\ell = \overline{0, N}$ , для кожного  $s = \overline{0, N}$  знаходяться шляхом розв'язання СЛАР

$$\sum_{\ell=1}^N \lambda_{s,\ell} (\beta_{s,\ell})^p = \delta_{p,s}, \quad 0 \leq p \leq N,$$

при умові, що  $-1 \leq \beta_{s,0} < \beta_{s,1} < \dots < \beta_{s,N} \leq 1$ ,  $s = 0, 1, \dots, N$ .

Нижче узагальнимо цей результат на випадок, коли сліди наближуваної функції та сліди її частинних похідних за змінною  $y$  до фіксованого порядку задаються на лінії  $y = \gamma(x) \in C^r(R)$ . Нехай  $f^{(0,s)}(x, y) = \partial^s f(x, y) / \partial y^s$ . Введемо до розгляду оператор

$$O_N f(x, y) = \sum_{\ell=1}^N \lambda_{0,\ell} f(x + \beta_{0,\ell}(y - \gamma(x)), \gamma(x)) + \\ + \sum_{s=1}^N \sum_{\ell=1}^N \lambda_{s,\ell} \int_0^{x+\beta_{s,\ell}(y-\gamma(x))} f^{(0,s)}(t, \gamma(t)) \frac{(x + \beta_{s,\ell}(y - \gamma(x)) - t)^{s-1}}{(s-1)!} dt,$$

де  $\beta_{s,\ell} \in [-1, 1]$ ,  $s = \overline{0, N}$ ,  $\ell = \overline{0, N}$  — задані різні числа (дійсні або комплексні), невідомі  $\lambda_{s,\ell}$ ,  $s = \overline{0, N}$ ,  $\ell = \overline{0, N}$ , для кожного значення  $s \in [0, N]$  знаходяться шляхом розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\sum_{\ell=1}^N \lambda_{s,\ell} (\beta_{s,\ell})^p = \delta_{p,s}, \quad 0 \leq p \leq N.$$

Зауважимо, що ці системи мають єдиний розв'язок, оскільки їх детермінанти  $\det[\beta_{s,\ell}^p]_{\ell=0, N}^{p=0, N} \neq 0$ ,  $s = \overline{0, N}$ , є детермінантами Вандермонда.

**Теорема 1.** *Оператор  $O_N f$  має властивості*

$$f \in C^r(R^2) \Rightarrow O_N f \in C^r(R^2),$$

$$\left. \frac{\partial^q O_N f(x, y)}{\partial y^q} \right|_{y=\gamma(x)} = \left. \frac{\partial^q f(x, y)}{\partial y^q} \right|_{y=\gamma(x)}, \quad 0 \leq q \leq N, \quad N \leq r.$$

Як частинний випадок, при  $\gamma(x) = 0$  отримуємо  $L_N f = O_N f$ .

**Оператори відновлення функції 2-х змінних в інтегральній формі за допомогою її слідів та слідів її похідних за однією змінною на заданій кривій лінії.** Введемо до розгляду оператор

$$D_N u(x, y) = \int_{-1}^1 G_0(\beta) u(x + \beta(y - \gamma(x)), \gamma(x)) d\beta + \\ + \sum_{s=1}^N \int_{-1}^1 G_s(\beta) \int_0^{x+\beta(y-\gamma(x))} u^{(0,s)}(t, \gamma(t)) \frac{(x + \beta(y - \gamma(x)) - t)^{s-1}}{(s-1)!} dt d\beta.$$

**Теорема 2.** Оператор  $D_N f$  має властивості

$$f \in C^r(\mathbb{R}^2) \Rightarrow D_N f \in C^r(\mathbb{R}^2),$$

$$\left. \frac{\partial^q D_N f(x, y)}{\partial y^q} \right|_{y=\gamma(x)} = \left. \frac{\partial^q f(x, y)}{\partial y^q} \right|_{y=\gamma(x)}, \quad 0 \leq q \leq N, \quad N \leq r,$$

$$\text{якщо } \int_{-1}^1 G_s(\beta) \beta^p d\beta = \delta_{s,p}, \quad 0 \leq s, p \leq N.$$

Введемо до розгляду ядра  $G_s(x, y, \beta)$ ,  $0 \leq s \leq N$ , інтегральних операторів, залежні від трьох змінних  $x, y, \beta$ , і побудуємо за їх допомогою такий інтегральний оператор, у якому функція і її частинні похідні за змінною  $y$  входять під знак інтеграла

$$D_N u(x, y) = \int_{-1}^1 G_0(x, y, \beta) u(x + \beta(y - \gamma(x)), \gamma(x)) d\beta + \\ + \sum_{s=1}^N \int_{-1}^1 G_s(x, y, \beta) \int_0^{x+\beta(y-\gamma(x))} u^{(0,s)}(t, \gamma(t)) \frac{(x + \beta(y - \gamma(x)) - t)^{s-1}}{(s-1)!} dt d\beta.$$

**Теорема 3.** Оператори  $D_N f(x, y)$  мають властивості

$$f \in C^r(\mathbb{R}^2) \Rightarrow D_N f \in C^r(\mathbb{R}^2),$$

$$\left. \frac{\partial^q D_N f(x, y)}{\partial y^q} \right|_{y=\gamma(x)} = \left. \frac{\partial^q f(x, y)}{\partial y^q} \right|_{y=\gamma(x)}, \quad 0 \leq q \leq N, \quad N \leq r,$$

$$\text{якщо } \int_{-1}^1 G_s(x, \gamma(x), \beta) \beta^p d\beta = \delta_{s,p}, \quad 0 \leq s, p \leq N.$$

1. Сергієнко І. В., Дейнека В. В. Системний аналіз. – Київ: Наук. думка, 2013. – 500 с.
2. Сергієнко І. В., Задірака В. К., Литвин О. М. Елементи загальної теорії оптимальних алгоритмів і суміжні питання. – Київ: Наук. думка, 2012. – 404 с.
3. Никольский С. М. Приближение функций многих переменных и теоремы вложения. – Москва: Наука, 1969. – 480 с.
4. Бесов О. В., Ильин В. П., Никольский С. М. Интегральные представления функций и теоремы вложения. – Москва: Наука, 1975. – 480 с.
5. Стейн И. Сингулярные интегралы и дифференциальные свойства функций / Пер. с англ. – Москва: Мир, 1973. – 342 с.
6. Владимиров В. С. Обобщенные функции в математической физике. – Москва: Наука, 1979. – 318 с.
7. Хермандер Л. Дифференциальные операторы с постоянными коэффициентами. – Москва: Мир, 1986. – 455 с.
8. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. – Москва: Наука, 1966. – 724 с.
9. Шилов Г. Е. Математический анализ. Второй специальный курс. – Москва: Наука, 1965. – 327 с.
10. Квасов Б. И. Методы изометрической аппроксимации сплайнами. – Москва: Физматлит, 2006. – 360 с.
11. Математическая энциклопедия / Под ред. И. М. Виноградова. В 5-ти т. Т. 5. – Москва: Сов. энциклопедия, 1984. – 1215 с.
12. Литвин О. М. Інтерполяція функцій та їх нормальних похідних на гладких лініях в  $\mathbb{R}^n$  // Доп. АН УРСР. Сер. А. – 1984. – № 7. – С. 15–19.

13. Литвин О. М. Точний розв'язок задачі Коші для рівняння  $\prod_{i=0}^n \left( \frac{\partial}{\partial t} - a_i^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) u(x, t) = g(x, t)$  // Там само. – 1991. – № 3. – С. 12–17.
14. Литвин О. М. Побудова функцій  $n$  змінних із заданими нормальними похідними на  $R^m$  ( $1 \leq m \leq n - 1$ ) із збереженням класу  $C^r(R^n)$  // Там само. – 1987. – № 5. – С. 13–17.
15. Литвин О. М. Інтерлінація функцій та деякі її застосування. – Харків: Основа, 2002. – 544 с.

Українська інженерно-педагогічна академія, Харків  
ДП “Івченко-Прогрес”, Запоріжжя

Надійшло до редакції 25.06.2013

**О. Н. Литвин, О. О. Литвин, А. В. Ткаченко, О. Л. Грицай**

**Восстановление функций двух переменных с сохранением класса  $C^r(R^2)$  с помощью их следов и следов их производных до фиксированной степени на заданной линии**

*Исследуются методы построения операторов восстановления дифференцируемых функций двух переменных в окрестности гладкой кривой, которые сохраняют класс дифференцируемости  $C^r(R^2)$ . Метод использует для построения указанных операторов следы приближаемой функции и ее частных производных по одной переменной до заданного порядка на указанной кривой.*

**O. M. Lytvyn, O. O. Lytvyn, O. V. Tkachenko, O. L. Gritsay**

**Recovery of the functions of two variables with preservation of the class  $C^r(R^2)$  with the help of their traces and the traces of their derivatives up to a fixed order on the given curve**

*The methods of construction of the operators of recovery of differentiable functions of two variables in a vicinity of the smooth curve, which preserve the class of differentiability  $C^r(R^2)$ , are studied. The methods use the traces of an approximated function and its partial derivatives with respect to one variable up to a given order on the given curve.*



УДК 539.3

Д. М. Ли́ла, академик НАН Украины А. А. Мартынюк

### Потеря устойчивости вращающегося упругопластического плоского диска с убывающим радиусом

*При исследовании методом малого параметра возможной потери устойчивости кругового диска установлена зависимость между критической скоростью вращения и переменным радиусом контурной окружности. На основании условия текучести Сен-Венана получено в первом приближении характеристическое уравнение относительно критического радиуса пластической зоны. Численно найдены значения критической угловой скорости вращения при различных параметрах системы.*

Решение задачи об устойчивости вращающегося диска при радиальном растяжении объемными силами предполагает определение критической угловой скорости [1, 2]. Для этого на основе линеаризованных по малому параметру краевых условий в напряжениях [3, 4] нужно построить характеристическое уравнение [5] относительно критического радиуса пластической зоны диска [6]. Связь между радиусом пластической области и скоростью вращения устанавливается сопряжением решений уравнения квазистатического равновесия [7] для основного напряженного состояния на неизвестной упругопластической границе. Возмущенное состояние в упругой зоне диска определяется по функциям напряжения [8] в зависимости от вида возмущения геометрических краевых условий (контурной окружности). Если предположить, что радиус контурной окружности уменьшается (например, вследствие горения края диска, коррозионных процессов, кавитационных повреждений или абляции контура диска при воздействии лазерного излучения и пр.), то интерес будет представлять влияние появляющейся разгрузки на сохранение устойчивости диска. При этом актуальным является получение условий потери устойчивости вращающегося диска в зависимости от соотношения между критической скоростью и убывающим радиусом контурной окружности.

**Постановка задачи.** Рассматривается однородный и изотропный плоский сплошной или кольцевой диск. Текущий радиус его контурной окружности равен  $b$ , где  $b \in (a, b_0]$ ,  $b_0$  — начальный радиус контурной окружности диска,  $a$  — внутренний радиус кольцевого диска (рис. 1). Предел текучести материала диска обозначен  $\sigma_s$ , модуль упругости —  $E$ , плотность —  $\gamma$ , коэффициент Пуассона —  $\nu$ . Постоянная угловая скорость вращения равна  $\omega$ ,

© Д. М. Ли́ла, А. А. Мартынюк, 2014



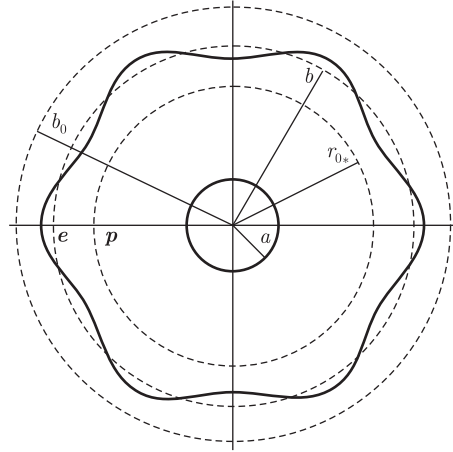


Рис. 1

текущий радиус пластической зоны невозмущенного диска —  $r_0$ . Предмет исследования составляет критическая угловая скорость  $\omega_*$  как функция радиуса  $b$ . Потеря устойчивости диска соответствует уравнению внешней его границы (с точностью до бесконечно малых первого порядка)

$$r = b + d \cos n\theta, \quad d = \text{const}, \quad n \in \mathbb{N},$$

или

$$\rho = \varphi + \delta \cos n\theta,$$

где  $\rho = r/b_0$  — безразмерный текущий радиус;  $\varphi = b/b_0$ ;  $\delta$  — малый параметр;  $\theta$  — полярный угол.

Материал диска с условием текучести  $\sigma_{\theta\theta} = \sigma_s$  не обладает упрочнением.

**Анализ сплошного диска.** Из уравнения равновесия

$$\frac{d\sigma_{rr}}{dr} + \frac{\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}}{r} = -\frac{\sigma}{b_0^2}r, \quad \sigma = \gamma b_0^2 \omega^2, \quad (1)$$

с учетом условия в центре диска  $\sigma_{rr}(0) = \sigma_{\theta\theta}(0)$  и условия текучести невозмущенное напряженное состояние в пластической зоне получаем в виде

$$\sigma_{\theta\theta} = \sigma_s, \quad \sigma_{rr} = \sigma_s - \frac{\sigma}{3b_0^2}r^2. \quad (2)$$

С использованием уравнений связи между напряжениями и перемещениями [4, 7] на основании уравнения (1) напряженное состояние упругой области определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} \sigma_{\theta\theta} &= C \left( 1 + \frac{b^2}{r^2} \right) + \frac{\sigma(\nu+3)}{8} \varphi^2 - \frac{\sigma(3\nu+1)}{8} \frac{r^2}{b_0^2}, \\ \sigma_{rr} &= C \left( 1 - \frac{b^2}{r^2} \right) + \frac{\sigma(\nu+3)}{8} \varphi^2 - \frac{\sigma(\nu+3)}{8} \frac{r^2}{b_0^2}. \end{aligned} \quad (3)$$

Сопряжение решений (2) и (3) на упругопластической границе  $\rho = \beta_0 := r_0/b_0$  позволяет конкретизировать выражения для напряжений (3), отнесенных к  $\sigma_s$ :

$$\begin{aligned}\sigma_{\theta\theta}^{0e} &= c(1 + \varphi^2 \rho^{-2}) + 3y((\nu + 3)\varphi^2 - (3\nu + 1)\rho^2), \\ \sigma_{rr}^{0e} &= c(1 - \varphi^2 \rho^{-2}) + 3y(\nu + 3)(\varphi^2 - \rho^2),\end{aligned}\quad (4)$$

где

$$\begin{aligned}c &:= \frac{C}{\sigma_s} = (3\nu + 1)\frac{\beta_0^4}{\tau}, & y &:= \frac{\omega^2}{24q^2} = \frac{\varphi^2}{\tau}, \\ \tau &= 3(\nu + 3)\varphi^4 - (3\nu + 1)(2\varphi^2 - \beta_0^2)\beta_0^2, & q &= b_0^{-1}\sqrt{\frac{\sigma_s}{\gamma}}.\end{aligned}$$

Таким образом,

$$\begin{aligned}A_1 &:= \frac{d\sigma_{rr}^{0e}(\varphi)}{d\rho} = \varphi^{-1} \frac{2(3\nu + 1)(\beta_0/\varphi)^4 - 6(\nu + 3)}{3(\nu + 3) - (3\nu + 1)(2 - (\beta_0/\varphi)^2)(\beta_0/\varphi)^2}, \\ A_2 &:= \sigma_{\theta\theta}^{0e}(\varphi) - \sigma_{rr}^{0e}(\varphi) = \frac{2(3\nu + 1)(\beta_0/\varphi)^4 + 6(1 - \nu)}{3(\nu + 3) - (3\nu + 1)(2 - (\beta_0/\varphi)^2)(\beta_0/\varphi)^2}.\end{aligned}\quad (5)$$

С учетом общего вида возмущенного напряженно-деформированного состояния упругой зоны диска начального радиуса  $b_0$  [8, 9] (например, при  $n \in \{2, 3, \dots\}$ ), а также введенных обозначений  $\rho$  и  $\varphi$  безразмерные возмущения первого порядка малости компонент напряжения и радиального смещения могут быть представлены так:

$$\begin{aligned}\sigma_{rr}^{te} &= \left( nA\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^{n-2} + nB\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^{-n-2} + (n-2)C\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^n + (n+2)D\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^{-n} \right) \cos n\theta, \\ \sigma_{\theta\theta}^{te} &= \left( -nA\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^{n-2} - nB\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^{-n-2} - (n+2)C\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^n - (n-2)D\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^{-n} \right) \cos n\theta, \\ \sigma_{r\theta}^{te} &= \left( -nA\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^{n-2} + nB\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^{-n-2} - nC\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^n + nD\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^{-n} \right) \sin n\theta, \\ u^{te} &= \varphi \frac{\sigma_s}{E} \left( \frac{(\nu+1)n}{n-1} A\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^{n-1} - \frac{(\nu+1)n}{n+1} B\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^{-n-1} + \frac{n-2+\nu(n+2)}{n+1} C\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^{n+1} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{n+2+\nu(n-2)}{n-1} D\left(\frac{\rho}{\varphi}\right)^{-n+1} \right) \cos n\theta.\end{aligned}\quad (6)$$

Поскольку претерпевает изменения также вид граничных условий и условий сопряжения в напряжениях [3, 4]

$$\begin{aligned}\sigma_{rr}^{te} + \frac{d\sigma_{rr}^{0e}}{d\rho} u^{te} &= 0, & \sigma_{r\theta}^{te} - \varphi^{-1}(\sigma_{\theta\theta}^{0e} - \sigma_{rr}^{0e}) \frac{du^{te}}{d\theta} &= 0 & \text{при} & \quad \rho = \varphi, \\ \sigma_{rr}^{te} &= 0, & \sigma_{r\theta}^{te} &= 0 & \text{при} & \quad \rho = \beta_0,\end{aligned}\quad (7)$$

опираясь на выражения (5) и (6), характеристическое уравнение в исследуемом случае получаем в виде

$$\Delta\left(\frac{\beta_0}{\varphi}\right) = 0, \quad (8)$$

где  $\Delta(\beta_0) = 0$  — характеристическое уравнение для диска с неизменным радиусом контурной окружности [9]. Последнее уравнение имеет корни  $\beta_{0*}$  [2, 9], зависящие для данного диска от натурального параметра  $n$ . Они совпадают с решениями характеристического уравнения (8). Отсюда с использованием формулы (4) для  $y$  сразу же получаем искомую зависимость критической угловой скорости от переменного радиуса контурной окружности диска

$$\frac{\omega_*}{q} = \frac{k}{\varphi}, \quad (9)$$

где  $k = 2\sqrt{6}/\sqrt{3(\nu+3) - (3\nu+1)(2-\beta_{0*}^2)\beta_{0*}^2}$ .

При  $n = 1$ , т. е. при рассмотрении эксцентричной формы потери устойчивости, функцию (9) следует взять с коэффициентом  $k = 2\sqrt{2}/\sqrt{\nu+3}$  [10].

**Анализ кольцевого диска.** Рассмотрим вначале диск, свободный от контурных усилий. В этом случае в пластической зоне вместо (2) используются зависимости

$$\sigma_{\theta\theta} = \sigma_s, \quad \sigma_{rr} = \sigma_s - \frac{\sigma}{3b_0^2}r^2 + \left(-\sigma_s + \frac{\sigma a^2}{3b_0^2}\right)\frac{a}{r}. \quad (10)$$

При сопряжении решений (10) и (3) получаем соотношения вида (4) с

$$c = \frac{(3\nu+1)\beta_0^4 - 4\beta^3\beta_0 + 1,5\beta\beta_0((\nu+3)\varphi^2 - (3\nu+1)\beta_0^2)}{\tau},$$

$$y = \frac{\varphi^2 - 0,5\beta\beta_0^{-1}(\varphi^2 + \beta_0^2)}{\tau},$$

$$\tau = 3(\nu+3)\varphi^4 - (3\nu+1)(2\varphi^2 - \beta_0^2)\beta_0^2 - 4\beta^3\beta_0^{-1}(\varphi^2 + \beta_0^2), \quad \beta = \frac{a}{b_0}. \quad (11)$$

Поэтому теперь (см. (5))

$$A_1 = \varphi^{-1}T^{-1} \left\{ 2(3\nu+1) \left[ \frac{\beta_0}{\varphi} \right]^4 - 8 \left[ \frac{\beta}{\varphi} \right]^3 \frac{\beta_0}{\varphi} + 3 \frac{\beta}{\varphi} \frac{\beta_0}{\varphi} \left( \nu+3 - (3\nu+1) \left[ \frac{\beta_0}{\varphi} \right]^2 \right) - \right.$$

$$\left. - 3(\nu+3) \left( 2 - \frac{\beta}{\varphi} \left[ \frac{\beta_0}{\varphi} \right]^{-1} \left( 1 + \left[ \frac{\beta_0}{\varphi} \right]^2 \right) \right) \right\}, \quad (12)$$

$$A_2 = T^{-1} \left\{ 2(3\nu+1) \left[ \frac{\beta_0}{\varphi} \right]^4 - 8 \left[ \frac{\beta}{\varphi} \right]^3 \frac{\beta_0}{\varphi} + 3 \frac{\beta}{\varphi} \frac{\beta_0}{\varphi} \left( \nu+3 - (3\nu+1) \left[ \frac{\beta_0}{\varphi} \right]^2 \right) + \right.$$

$$\left. + 3(1-\nu) \left( 2 - \frac{\beta}{\varphi} \left[ \frac{\beta_0}{\varphi} \right]^{-1} \left( 1 + \left[ \frac{\beta_0}{\varphi} \right]^2 \right) \right) \right\},$$

где

$$T = 3(\nu+3) - (3\nu+1) \left( 2 - \left[ \frac{\beta_0}{\varphi} \right]^2 \right) \left[ \frac{\beta_0}{\varphi} \right]^2 - 4 \left[ \frac{\beta}{\varphi} \right]^3 \left[ \frac{\beta_0}{\varphi} \right]^{-1} \left( 1 + \left[ \frac{\beta_0}{\varphi} \right]^2 \right).$$

Характеристическое уравнение относительно  $\beta_0/\varphi$

$$\tilde{\Delta} \left( \frac{\beta_0}{\varphi}, \frac{\beta}{\varphi} \right) = 0, \quad (13)$$

построенное на основе (6), (7), (12), является уравнением с параметром  $\beta/\varphi$ . Присваивая  $\varphi$  произвольные значения с промежутка  $(\beta, 1]$ , находим соответствующие решения  $\beta_0/\varphi = \beta_{0*}$  уравнения (13). Это позволяет получить относительную критическую скорость в зависимости от  $\varphi$ , полагая в (11)  $\beta_0 = \varphi\beta_{0*}$ .

Далее предположим, что кольцевой диск с уменьшающимся радиусом контурной окружности испытывает на внутреннем контуре дополнительное радиальное давление [10, 11]

$$p = \frac{1}{3}\gamma\omega^2 \frac{b^3 - a^3}{a}.$$

Сопряжение решений

$$\sigma_{\theta\theta} = \sigma_s, \quad \sigma_{rr} = \sigma_s - \frac{\sigma}{3b_0^2}r^2 + \left(-p - \sigma_s + \frac{\sigma a^2}{3b_0^2}\right)\frac{a}{r}$$

с решениями (3) при  $r = r_0$  приводит к следующим аналогам (11) и (12):

$$\begin{aligned} y &= \varphi^{-2}T^{-1}\left(1 - 0,5\xi\frac{\beta}{\varphi}\left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^{-1}\left(1 + \left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^2\right)\right), \\ A_1 &= \varphi^{-1}T^{-1}\left\{2(3\nu + 1)\left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^4 - 8\left[\frac{\beta}{\varphi}\right]^3\frac{\beta_0}{\varphi} + 3\xi\frac{\beta}{\varphi}\frac{\beta_0}{\varphi}\left(\nu + 3 - (3\nu + 1)\left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^2\right) - \right. \\ &\quad \left. - 3(\nu + 3)\left(2 - \xi\frac{\beta}{\varphi}\left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^{-1}\left(1 + \left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^2\right)\right)\right\}, \\ A_2 &= T^{-1}\left\{2(3\nu + 1)\left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^4 - 8\left[\frac{\beta}{\varphi}\right]^3\frac{\beta_0}{\varphi} + 3\xi\frac{\beta}{\varphi}\frac{\beta_0}{\varphi}\left(\nu + 3 - (3\nu + 1)\left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^2\right) + \right. \\ &\quad \left. + 3(1 - \nu)\left(2 - \xi\frac{\beta}{\varphi}\left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^{-1}\left(1 + \left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^2\right)\right)\right\}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \xi &= \left\{3(\nu + 3) - (3\nu + 1)\left(2 - \left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^2\right)\left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^2 - 4\left[\frac{\beta}{\varphi}\right]^3\left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^{-1}\left(1 + \left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^2\right) + \right. \\ &\quad \left. + 8\left[\frac{\beta}{\varphi}\right]^{-1}\left(1 - \left[\frac{\beta}{\varphi}\right]^3\right)\right\}\left\{3(\nu + 3) - (3\nu + 1)\left(2 - \left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^2\right)\left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^2 + \right. \\ &\quad \left. + 4\left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^{-1}\left(1 - 2\left[\frac{\beta}{\varphi}\right]^3\right)\left(1 + \left[\frac{\beta_0}{\varphi}\right]^2\right)\right\}^{-1}. \end{aligned}$$

Следовательно, характеристическое уравнение (13) приобретает несколько иной вид, учитывающий влияние внутреннего давления на скорость движения упругопластической границы. По предположению, это еще больше, чем в случае кольцевого диска, свободного от контурных усилий, нарушает характер обратной пропорциональности (9).

**Числовые примеры и обсуждение результатов.** В справедливости последнего предположения нетрудно убедиться, если рассматривать в каждом из трех изученных случаев диски одинакового начального радиуса из одного и того же материала. На рис. 2

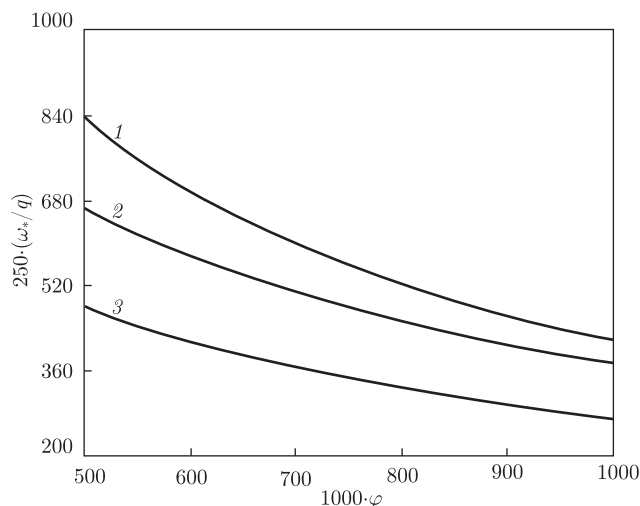


Рис. 2

представлены графики искомых зависимостей относительной критической скорости  $\omega_*/q$  от уменьшающегося радиуса контурной окружности  $\varphi$ ,  $\varphi \in [0,5; 1]$ , для сплошного и кольцевого ( $\beta = 0,2$ ) плоских дисков с параметрами  $n = 2$ ,  $\nu = 0,5$ ,  $\sigma_s/E = 0,01$  (для сплошного диска (кривая 1), кольцевого диска, свободного от контурных усилий (кривая 2), кольцевого диска, находящегося под действием дополнительного внутреннего радиального давления (кривая 3)). По виду графиков понятно, что появляющаяся с уменьшением радиуса диска разгрузка способствует сохранению его устойчивости. При существенном уменьшении радиуса контурной окружности критическая скорость может возрасти тоже существенно. При этом для любого  $\varphi$  наиболее устойчив сплошной диск, а наименее устойчив — нагруженный кольцевой диск. По мере уменьшения наружного радиуса диска разность значений критической скорости увеличивается в пользу сплошного диска. Наиболее сильно отклоняется от обратной пропорциональности зависимость  $\omega_*/q(\varphi)$  для нагруженного дополнительным внутренним давлением кольцевого диска.

1. *Ивлев Д. Д.* О потере несущей способности вращающихся дисков, близких к круговому // Изв. АН СССР. ОТН. – 1957. – № 1. – С. 141–144.
2. *Ершов Л. В., Ивлев Д. Д.* О потере устойчивости вращающихся дисков // Там же. – 1958. – № 1. – С. 124–125.
3. *Ивлев Д. Д., Ершов Л. В.* Метод возмущений в теории упругопластического тела. – Москва: Наука, 1978. – 208 с.
4. *Гузь А. Н., Немчи Ю. Н.* Метод возмущения формы границы в механике сплошных сред. – Киев: Выща шк., 1989. – 352 с.
5. *Гузь А. Н., Бабич И. Ю.* Трехмерная теория устойчивости деформируемых тел. – Киев: Наук. думка, 1985. – 280 с.
6. *Соколовский В. В.* Теория пластичности. – Москва: Высш. шк., 1969. – 608 с.
7. *Бицено К. Б., Граммель Р.* Техническая динамика. Т. 2. – Москва; Ленинград: ГИТТЛ, 1952. – 640 с.
8. *Бицено К. Б., Граммель Р.* Техническая динамика. Т. 1. – Москва; Ленинград: ГИТТЛ, 1950. – 900 с.
9. *Лыла Д. М., Мартынюк А. А.* О потере устойчивости вращающегося упруго-пластического кругового диска // Доп. НАН України. – 2011. – № 1. – С. 44–51.
10. *Лыла Д. М.* Эксцентричная форма потери устойчивости вращающегося упруго-пластического диска // Там само. – 2011. – № 2. – С. 49–53.

11. Lila D. M., Martynyuk A. A. Development of instability in a rotating elastoplastic annular disk // Int. Appl. Mech. – 2012. – 48, No 2. – P. 224–233.

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

*Поступило в редакцию 15.04.2013*

**Д. М. Ли́ла, академік НАН України А. А. Марти́нюк**

**Втрата стійкості пружнопластичного плоского диска,  
що обертається, зі спадним радіусом**

*При дослідженні методом малого параметра можливої втрати стійкості кругового диска встановлено залежність між критичною швидкістю обертання та змінним радіусом контурного кола. На підставі умови текучості Сен-Венана одержано у першому наближенні характеристичне рівняння відносно критичного радіуса пластичної зони. Чисельно знайдено значення критичної кутової швидкості обертання при різних параметрах системи.*

**D. M. Lila, Academician of the NAS of Ukraine A. A. Martynyuk**

**The loss of stability of a rotating resilient plastic plane disk with  
decreasing radius**

*The dependence of the critical speed of rotation on the variable radius of a contour circle is determined by means of the small parameter method. Proceeding from the Saint-Venant condition of fluidity, we obtain the characteristic equation for the critical radius of a plastic zone in the first approximation. The values of the critical angular speed of rotation for various parameters of the system are determined numerically.*

**В. Л. Поляков**

## **К оценке эффекта упорядочения структуры несвязного грунта при неустановившейся напорной плоской фильтрации**

*(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины А. Я. Олейником)*

*Найдено аналитическими методами и обосновано приближенное решение нестационарной задачи плоской напорной фильтрации на ее начальной стадии в однородном несвязном недеформированном грунте. На его основе получено выражение для профиля относительного коэффициента фильтрации грунта, частицы скелета которого в течение этой стадии успели переориентироваться вдоль потока. Выполнена оценка последствий указанного эффекта для установившегося фильтрационного режима при скоротечном и длительном характере развития деформаций на примере линейного совершенного водоприемника.*

Интенсивное течение грунтовых и подземных вод в несвязных грунтах нередко порождает фильтрационные деформации специального типа, состоящие в переориентации несферических частиц скелета в направлении движения жидкости [1, 2]. Ранее аналитическими методами углубленно изучались физико-механическое состояние и фильтрационный режим грунта, сформировавшиеся в результате длительного протекания подобного деформационного процесса на фоне плавного и ограничено усиливающегося фильтрационного [3, 4]. При таком подходе путем математического моделирования удавалось сделать только минимальную оценку возможных последствий частичного упорядочения структуры грунта. В действительности, за счет интенсивного снеготаяния, ливневых осадков, увлажнительных мероприятий, а особенно при вводе в эксплуатацию дренажей, гидротехнических сооружений в несвязных и слабосвязных грунтах складывается экстремальная обстановка, которая благоприятствует активному развитию фильтрационных деформаций. Их степень и область распространения из-за вносимых в фильтрационный поток извне весьма серьезных возмущений, даже несмотря на обычную кратковременность последних, часто существенно превосходят аналогичные показатели деформаций в первом случае, который на практике реализуется при медленном изменении метеорологических и техногенных факторов. Как следствие, во втором случае оказывается, что деформационный эффект намного значимее, а установившийся фильтрационный режим тесно связан со своей предысторией. Очевидно, что для надежного учета в инженерных расчетах сопутствующего указанному эффекту улучшения проницаемости грунта необходимо опираться на нестационарные модели фильтрации. Вместе с тем важное значение с формальной точки зрения приобретает корректность выбора исходного водно-физического состояния грунта, так как оно во многом определяет фильтрационный процесс на начальной стадии, когда регулирующие его элементы воздействуют непосредственно на окружающую их жидкость и опосредовано на скелет среды наиболее сильно. Поэтому на данной стадии, в течение которой деформации

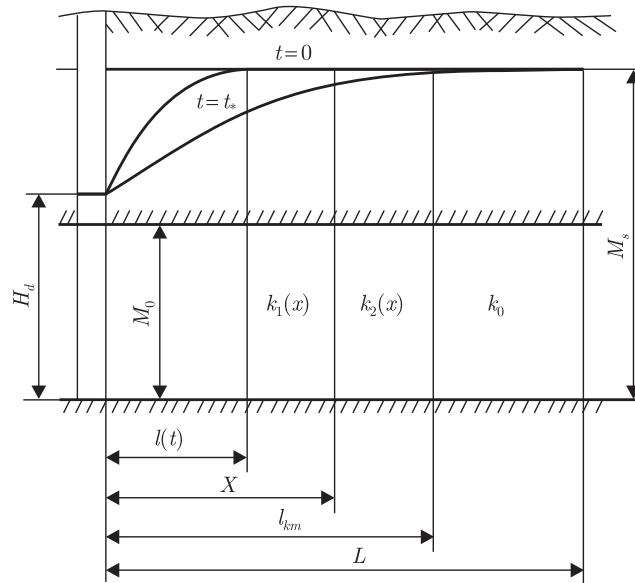


Рис. 1. Схема неустановившейся плоской напорной фильтрации в несвязном грунте с локально упорядоченной структурой

в основном успевают завершиться, целесообразно выделять зону влияния этого элемента. А поскольку целью настоящей работы является приближенная к реальности оценка ожидаемой интенсификации притока к водоприемникам вследствие локального упорядочения структуры несвязного грунта, то математический анализ проводился последовательно для нестационарных и стационарных условий с детальным учетом специфики поведения коэффициента фильтрации в области деформаций. Базовой для такого анализа стала математическая модель неустановившейся плоской напорной фильтрации к совершенному линейному водоприемнику (водозабору) в однородном недеформированном грунте (рис. 1). Соответствующая задача для начальной фильтрации в пределах выделенной расширяющейся зоны влияния водоприемника протяженностью  $l$  формулируется следующим образом:

$$k_0 M_0 \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = \mu \frac{\partial h}{\partial t}; \quad (1)$$

$$x = 0, \quad h = H_d; \quad x = L, \quad h = M_s; \quad (2)$$

$$x = l(t), \quad h = M_s; \quad \frac{\partial h}{\partial x} = 0; \quad (3)$$

$$t = 0, \quad h = M_s; \quad l = 0. \quad (4)$$

Здесь  $k_0$  — коэффициент фильтрации;  $M_0$  — мощность водоносного пласта;  $h$  — пьезометрический напор;  $\mu$  — упругая водоотдача;  $H_d$ ,  $M_s$  — напоры на водоприемнике и водосточнике;  $L$  — расстояние между ними;  $l$  — координата подвижной границы зоны влияния.

Приближенное решение задачи (1)–(4) построено в предположении, что сокращение объема воды в пласте со временем происходит равномерно вдоль фильтрационного течения и, следовательно, правый член в уравнении (1) является функцией только от  $t$ . После введения безразмерных величин  $\tilde{h} = (h - H_d)/(M_s - H_d)$ ,  $\bar{x} = x/L$ ,  $\bar{t} = k_0 M_0 t / (\mu L^2)$ ,  $\bar{l} = l/L$



и несложных выкладок получены простейшее выражение для относительного расхода водоприемника  $\bar{q}_0$  и закономерность перемещения границы зоны его влияния

$$\bar{q}_0(\bar{t}) = \frac{q_0(t)}{k_0(M_s - H_d)I_0} = \frac{1}{\sqrt{3\bar{t}}}, \quad (5)$$

$$\bar{l}(\bar{t}) = \sqrt{12\bar{t}}, \quad (6)$$

где  $I_0 = (M_s - H_d)/L$ . В соответствии с (6) относительная продолжительность начальной стадии  $\bar{t}_*$ , принимая во внимание условие  $\bar{l}(\bar{t}_*) = 1$ , составила 1/12.

Правомочность принятого выше допущения относительно характера изменения фильтрационного расхода в области движения обосновывается сопоставлением представленного приближенного решения задачи (1)–(4) и точного решения аналогичной задачи без предварительного ее упрощения. Последнее приведено в работе [5]. Для расчетов фильтрации на рассматриваемой стадии предпочтительнее решение, выраженное зависимостью

$$\tilde{h}(\bar{x}, \bar{t}) = \operatorname{erf} \frac{\bar{x}}{2\sqrt{\bar{t}}} - \sum_{n=1}^{\infty} \left( \operatorname{erfc} \frac{2n + \bar{x}}{2\sqrt{\bar{t}}} - \operatorname{erfc} \frac{2n - \bar{x}}{2\sqrt{\bar{t}}} \right), \quad (7)$$

где  $\operatorname{erfc} y = 1 - \operatorname{erfc} y$ ,  $\operatorname{erfc} y = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y e^{-\xi^2} d\xi$ . Быстрая сходимость ряда в (7) имеет место

как раз при малых значениях  $\bar{t}$ , что характерно для начальной стадии. Из (7) вытекает формула для вычисления расхода  $\bar{q}_0$ , а именно,

$$\bar{q}_0(\bar{t}) = \frac{1}{\sqrt{\pi\bar{t}}} \left[ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{n^2}{\bar{t}}\right) \right]. \quad (8)$$

Сравнение (5) и (8) показывает, что погрешность при вычислении расхода  $\bar{q}_0$  по первой формуле стабильно минимальная и равна  $1 - \sqrt{3/\pi}$ , что составляет 2.3%. Таким образом привлечение приближенного решения для последующих оценок значимости деформационного эффекта прежде всего оправдывается благодаря его высокой точности. С другой стороны, массовая переориентация частиц скелета обуславливает при моделировании фильтрационного процесса незначительное возмущение его характеристик. Поэтому в первом приближении указанное решение должно давать в целом правильную картину пространственно-временных изменений градиента также и в деформируемом грунте. Кстати, этот прием ранее успешно применялся в теоретических исследованиях установившейся фильтрации в несвязном несупфозионном грунте [6, 7]. Итак, для текущего градиента  $\bar{I}(\bar{x}, \bar{t})$ , исходя из решения задачи (1)–(4), принимается следующее выражение:

$$\bar{I}(\bar{x}, \bar{t}) = \frac{1}{\sqrt{3\bar{t}}} - \frac{\bar{x}}{6\bar{t}}. \quad (9)$$

Отсюда следует, что в сечении фильтрационного потока с координатой  $\bar{x}_m$  градиент  $\bar{I}$  достигнет своего максимума в момент времени

$$\bar{t}_m = \frac{x_m^2}{3}. \quad (10)$$

С физической точки зрения данный факт означает, что все несферические частицы скелета, которые здесь были способны в создавшихся гидродинамических условиях оптимизировать свое положение, реализовали такую возможность. Естественно, что отвечающее подобной ситуации значение коэффициента фильтрации необходимо зафиксировать. Итак, область деформаций в любой момент времени  $t < t_*$  можно разделить на два участка, а именно  $[0, X]$  и  $[X, \bar{l}_k]$ . Значение  $X$  вычисляется согласно (10) по формуле

$$X(\bar{t}) = \sqrt{3\bar{t}}, \quad (11)$$

а положение удаляющейся от водоприемника границы между деформированным и недеформированным грунтом предлагается находить с помощью формулы

$$\bar{l}_k(\bar{t}) = \sqrt{12\bar{t}} - 6\bar{t}\bar{I}_k, \quad (12)$$

которая вытекает из выражения (9) при  $\bar{I} = \bar{I}_k$ .

При определении величины  $\bar{k}(\bar{x})$  в конце начальной стадии фильтрации, что требуется для последующих реальных оценок значимости упорядочения структуры несвязных грунтов, вводится относительный эффективный градиент напора  $\bar{I}_*$  как функция только от  $\bar{x}$ . Под ним понимается совокупность наибольших в пределах сформировавшейся в итоге области деформаций значений текущего градиента, имевших место в течение расчетного периода  $[0, \bar{t}_*]$ . Отмеченные значения могут быть, во-первых, абсолютными максимумами, если производная  $\partial\bar{I}/\partial\bar{t}$  в промежуточный момент времени обращается в 0; во-вторых, условными максимумами, если она весь этот период положительная. Поэтому в вышеупомянутой области при особо благоприятных для развития фильтрационных деформаций условиях ( $\bar{I}_k < 1$ ) следует выделить две характерные подобласти —  $[0, X_m]$  и  $[X_m, \bar{l}_{km}]$ . В первой из них функции  $\bar{I}(\bar{t})$  и  $\bar{k}(\bar{t})$  успевают на протяжении расчетного периода достигнуть абсолютных максимумов, причем значения этих максимумов по мере удаления от водоприемника убывают, а при  $\bar{x} = X_m = 1/2$  становятся наименьшими. Так,

$$\bar{I} = 1, \quad \bar{k} = \frac{\bar{k}_u + \bar{\alpha}}{\bar{K} + 1}. \quad (13)$$

Искомое распределение  $\bar{I}_*(\bar{x})$  в пределах первой подобласти находится путем подстановки выражения  $\bar{t}(\bar{x})$  (10) в представление для  $\bar{I}(\bar{x}, \bar{t})$  (9). В результате получено

$$\bar{I}_*(\bar{x}) = \frac{1}{2\bar{x}} \quad \text{при} \quad \frac{1}{2} \geq \bar{x} \geq 0. \quad (14)$$

Во второй подобласти градиент  $\bar{I}$  является монотонно возрастающей со временем функцией, которая принимает наибольшие значения в конце расчетного периода. Предельная длина области деформаций  $\bar{l}_{km}$  вычисляется из (12) при  $\bar{t} = \bar{t}_*$  и будет иметь вид

$$\bar{l}_{km} = 1 - 0,5\bar{I}_k. \quad (15)$$

Подстановка же значения  $\bar{t} = \bar{t}_* = 1/12$  в (9) дает второй фрагмент  $\bar{I}_*(\bar{x})$

$$\bar{I}_*(\bar{x}) = 2 - 2\bar{x} \quad \text{при} \quad \bar{l}_{km} \geq \bar{x} > \frac{1}{2}. \quad (16)$$

Легко убедиться, что при  $\bar{x} = \bar{l}_{km}$  будут  $\bar{I}_* = \bar{I}_k$  и значит  $\bar{k} = 1$ .

Однако в действительности гораздо чаще справедливо соотношение  $\bar{I}_k > 1$ , а деформации оказываются локализованными около водоприемника. В таком случае двухзначная функция  $\bar{I}(\bar{t}; X)$  в первый раз достигает критического значения  $\bar{I}_k$  в фазе подъема за время

$$\bar{t}_1 = \frac{1}{12\bar{I}_k^2} \left( 1 - \sqrt{1 - 2\bar{I}_k X} \right). \quad (17)$$

Во второй раз это происходит уже в фазе спада градиента  $\bar{I}$  в момент времени

$$\bar{t}_2 = \frac{1}{12\bar{I}_k^2} \left( 1 + \sqrt{1 - 2\bar{I}_k X} \right). \quad (18)$$

Тогда область деформации будет ограничена сечением  $\bar{x} = X_k$ , в котором максимальное значение  $\bar{I}$  составит  $\bar{I}_k$ . Согласно (17) и (18), подобное случится, если  $\bar{t}_1$  сравняется с  $\bar{t}_2$ . Для этого необходимо, чтобы

$$X = X_k = \frac{1}{2\bar{I}_k}. \quad (19)$$

Таким образом, эффективный градиент  $\bar{I}_*$  при  $\bar{I}_k > 1$  имеет вид (14), а его областью определения является интервал

$$X_k = \frac{1}{2\bar{I}_k} \geq \bar{x} \geq 0.$$

Очевидно, что при  $\bar{x} = X_k$  имеет место исходный коэффициент фильтрации ( $\bar{k} = 1$ ).

Если теперь воспользоваться для эмпирической зависимости коэффициента  $\bar{k}$  от градиента  $\bar{I}$  аппроксимационным выражением из работ [8], то в обоих случаях ( $\bar{I}_k > 1$ ,  $\bar{I}_k < 1$ ) будет справедливо обобщенное представление

$$\bar{k}(\bar{I}_*) = \frac{\bar{k}_u \bar{I}_* + \bar{\alpha}}{\bar{I}_* + \bar{K}}, \quad (20)$$

где  $\bar{k}_u = k_u/k_0$ ;  $\bar{\alpha} = \bar{K} - (\bar{k}_u - 1)\bar{I}_k$ ;  $\bar{K} = K/I_0$ ,  $k_u$  — предельный коэффициент фильтрации (все структурные частицы переориентированы);  $K$  — эмпирическая константа. С учетом же (14) и (16) окончательно получено

$$\bar{k}(\bar{x}) = \bar{k}_1(\bar{x}) = \frac{2\bar{\alpha}\bar{x} + \bar{k}_u}{2\bar{K}\bar{x} + 1} \quad \text{при} \quad X_{k,m} \geq \bar{x} \geq 0, \quad (21)$$

$$\bar{k}(\bar{x}) = \bar{k}_2(\bar{x}) = \frac{2\bar{k}_u + \bar{\alpha} - 2\bar{k}_u\bar{x}}{2 + \bar{K} - 2\bar{x}} \quad \text{при} \quad \bar{l}_{km} \geq \bar{x} > X_m. \quad (22)$$

Непосредственно деформационный эффект оценивается для условий установившейся напорной фильтрации между совершенными в гидродинамическом отношении контуром питания и водоприемником. Скоротечное упорядочение структуры несвязного грунта на прилегающем к водоприемнику участке обусловило здесь существенное улучшение проницаемости грунта. Соответствующая математическая модель с учетом непрерывности коэффициента фильтрации в области движения формулируется в безразмерной форме при ( $\bar{I}_k > 1$  или  $\bar{I}_k < 1$ ) следующим образом:

$$\frac{d}{d\bar{x}} \left[ \bar{k}_i(\bar{x}) \frac{d\bar{h}_i}{d\bar{x}} \right] = 0 \quad \text{при} \quad X_{k,m} \geq \bar{x} \geq 0 \quad (i = 1), \quad \bar{l}_{km} \geq \bar{x} > 0,5 \quad (i = 2), \quad (23)$$

$$\frac{d^2 \tilde{h}_0}{d\bar{x}^2} = 0 \quad \text{при} \quad 1 \geq \bar{x} > X_k \text{ или } \bar{l}_{km}; \quad (24)$$

$$\bar{x} = 0, \quad \tilde{h}_1 = 0; \quad \bar{x} = 1, \quad \tilde{h}_0 = 1. \quad (25)$$

Кроме того, в первом случае ( $\bar{I}_k < 1$ )

$$\bar{x} = X_m, \quad \tilde{h}_1 = \tilde{h}_2; \quad \frac{d\tilde{h}_1}{d\bar{x}} = \frac{d\tilde{h}_2}{d\bar{x}}; \quad \bar{x} = \bar{l}_{km}, \quad \tilde{h}_2 = \tilde{h}_0; \quad \frac{d\tilde{h}_2}{d\bar{x}} = \frac{d\tilde{h}_0}{d\bar{x}}, \quad (26)$$

а во втором случае ( $\bar{I}_k > 1$ )

$$\bar{x} = X_k, \quad \tilde{h}_1 = \tilde{h}_0; \quad \frac{d\tilde{h}_1}{d\bar{x}} = \frac{d\tilde{h}_0}{d\bar{x}}, \quad (27)$$

и второе уравнение в системе (23) исключается.

Важнейшим следствием полученного точного решения задачи (23)–(26) является формула для расчета относительного фильтрационного расхода

$$\bar{q}_\infty = (1 - \bar{l}_{km} + P_1 + P_2)^{-1}, \quad (28)$$

где

$$P_1 = \frac{\bar{K}}{2\bar{k}_u} \left[ 2\bar{l}_{km} - 1 + \left( \frac{2\bar{k}_u + \bar{\alpha}}{\bar{k}_u} - \frac{2 + \bar{K}}{\bar{K}} \right) \ln \frac{2\bar{k}_u(1 - \bar{l}_{km}) + \bar{\alpha}}{\bar{k}_u + \bar{\alpha}} \right],$$

$$P_2 = \frac{\bar{K}}{2\bar{\alpha}} \left[ 1 + \left( \frac{1}{\bar{K}} - \frac{\bar{k}_u}{\bar{\alpha}} \right) \ln(\bar{k}_u + \bar{\alpha}) \right].$$

Аналогично из решения задачи (23)–(25), (27) вытекает вторая основная расчетная формула

$$\bar{q}_\infty = (1 - X_k + P_3)^{-1}, \quad (29)$$

где

$$P_3 = \frac{\bar{K}}{\bar{\alpha}} \left[ X_k + \left( \frac{1}{2\bar{K}} - \frac{\bar{k}_u}{2\bar{\alpha}} \right) \ln(2\bar{\alpha}X_k + \bar{k}_u) \right].$$

О важности корректного учета в фильтрационных расчетах реального деформирования несвязных грунтов свидетельствует проведенный на ряде характерных примеров количественный анализ. Исходная информация о модельных параметрах при этом подбиралась так, чтобы отразить разнообразие природных и техногенных условий. В частности, предельный коэффициент  $\bar{k}_u$  или изменялся непрерывно на интервале [1, 2], или фиксировался (1,5). Устойчивость грунта по отношению к гидродинамическому воздействию на него фильтрационного потока характеризуется двумя параметрами ( $\bar{K}$ ,  $\bar{I}_k$ ). В примерах  $\bar{K}$  менялся с дискретом 0,5 и выбирались три значения  $\bar{I}_k$  (0,5, 1, 1,5), что дало возможность проиллюстрировать базовые формулы (28), (29) и вместе с тем полно оценить значимость развившихся на начальной стадии фильтрационного процесса деформаций для притока к совершенному водоприемнику. Расчеты выполнялись по формулам (21), (22) и (28), (29). Также привлекались результаты теоретических исследований установившейся напорной фильтрации,

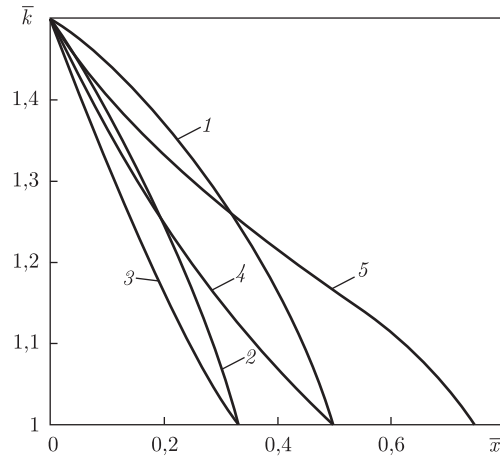


Рис. 2. Профили относительного коэффициента фильтрации в области деформаций:  
 1, 2 –  $\bar{K} = -0,5$ ; 3–5 –  $\bar{K} = 0,5$ ; 1, 4 –  $\bar{I}_k = 1$ ; 2, 3 –  $\bar{I}_k = 1,5$ ; 5 –  $\bar{I}_k = 0,5$

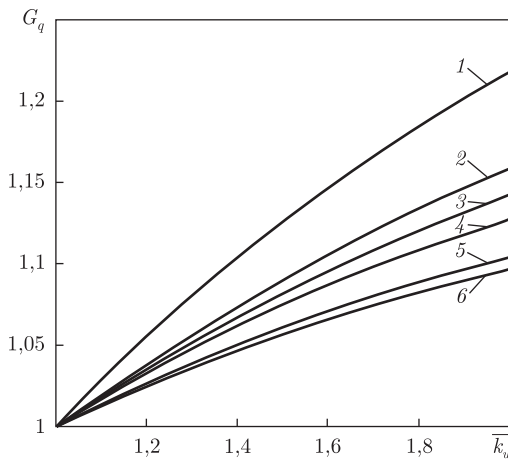


Рис. 3. Зависимость  $G_q(\bar{k}_u)$ :  
 1, 4 –  $\bar{K} = -0,5$ ; 2, 5 –  $\bar{K} = 0,5$ ; 3, 6 –  $\bar{K} = 1$ ; 1–3 –  $\bar{I}_k = 1$ ; 4–6 –  $\bar{I}_k = 1,5$

которая одновременно является причиной и следствием локального упорядочения структуры грунта [9]. Фактически подобный подход дает представление главным образом о минимально возможных последствиях специфической трансформации несвязного грунта для его регулируемого водного режима.

Данные вычислений профилей  $\bar{k}(\bar{x})$  для  $\bar{K} = \pm 0,5$  и разных  $\bar{I}_k$  приведены на рис. 2. Вследствие значительной гидродинамической силы на входе в водоприемник уже в самом начале его действия коэффициент  $\bar{k}$  здесь почти предельный (1,5), а с увеличением  $\bar{x}$  быстро убывает. Форма профилей существенно зависит от  $\bar{K}$ , а размеры профилей деформаций — от  $\bar{I}_k$ . В частности, при  $\bar{I}_k = 0,5$  деформации охватывают большую часть области движения. И хотя деформации носят локальный и частичный характер, тем не менее они способны заметно интенсифицировать фильтрационный процесс. На рис. 3 и 4 показана зависимость относительного приращения фильтрационного расхода  $q_\infty(G_{q_\infty})$  от степени деформаций ( $\bar{k}_u$ ), произошедших на начальной стадии фильтрации. В качестве контроля взят аналогичный расход в недеформированном грунте  $q_{\infty 0}$ , так что  $G_{q_\infty} = (q_\infty - q_{\infty 0})/q_{\infty 0}$ . Сначала

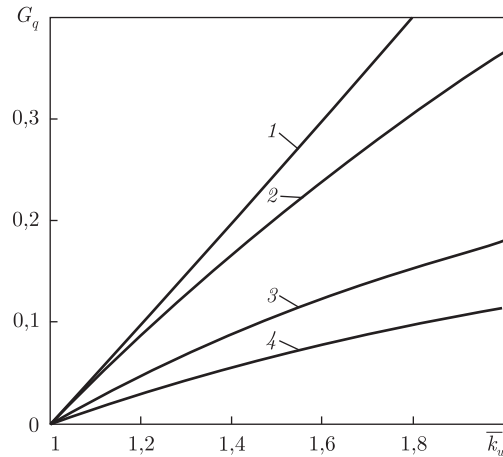


Рис. 4. Зависимость  $G_q(\bar{k}_u)$ :  
 1, 2 –  $\bar{I}_k = 0,5$ ; 3 –  $\bar{I}_k = 1$ ; 4 –  $\bar{I}_k = 1,5$

варьировались  $\bar{K}(-0,5, 0,5, 1)$  и  $\bar{I}_k(1, 1,5)$ . Максимальный эффект имел место при меньших значениях  $\bar{K}$ ,  $\bar{I}_k$  и большем  $\bar{k}_u$ , что отвечает грунту с рыхлой структурой и большим количеством несферических частиц скелета. Как видно из рис. 3, в таком случае расход увеличился на 21,8%. С ростом  $\bar{K}$  и особенно  $\bar{I}_k$  значимость деформаций хотя и ощущаемо уменьшается, но учитывать их в фильтрационных расчетах все-таки целесообразно. Следует заметить, что фильтрационные деформации намного слабее влияют на плоские потоки, чем на осесимметричные и радиальные.

И в заключение сопоставлялись данные расчетов  $\bar{q}_\infty$  в случаях, когда на грунт воздействуют или существенно нестационарный, или стационарный фильтрационные процессы. Кривые зависимости  $G_q(\bar{k}_u)$  на рис. 4 определялись при  $\bar{K} = 0$  и тех же значениях  $\bar{I}_k$ . Согласно [9], деформации в напорных условиях будут протекать при условии ( $\bar{I}_k > 1$ ,  $\bar{I}_k < 1$ ), которое на практике редко выполняется. Тогда, следуя теории установившейся фильтрации в несвязных грунтах, деформации при  $\bar{I}_k = 1$  и 1,5 вообще не должны происходить, а в соответствии с полученными выше результатами они приводят к серьезному приросту фильтрационного расхода. Ситуация кардинально меняется в тех исключительных случаях, когда  $\bar{I}_k < 1$ . Тогда нельзя ограничиваться рассмотрением деформаций только на начальной стадии, так как они будут продолжаться неограниченно долго и в конце концов обусловят существенно больший приток к водоприемнику (кривая 1).

1. Дмитриев А. Ф., Хлапук Н. Н., Дмитриев Д. А. Деформационные процессы в несвязных грунтах в придонной зоне и их влияние на работу осушительно-увлажнительных систем. – Ровно: Изд-во РГТУ, 2002. – 145 с.
2. Шейдеггер А. Э. Физика течения жидкостей через пористые среды. – Москва: Гостоптехиздат, 1960. – 250 с.
3. Поляков В. Л., Желизко В. В. Установившаяся напорная фильтрация к малому сферическому стоку в несвязном несупфозионном грунте // Прикл. гідромеханіка. – 2009. – **11(83)**. – С. 68–79.
4. Поляков В. Л., Желизко В. В. Расчет установившейся фильтрации к систематическому дренажу при наличии инфильтрации в несвязных несупфозионных грунтах // Пробл. водопостачання, водовідведення та гідраліки. – Київ: КНУБА, 2009. – Вип. 12. – С. 114–124.
5. Лыков А. В. Теория теплопроводности. – Москва: Высш. школа, 1967. – 599 с.
6. Іващенко А. П. Фізичне та математичне моделювання процесів деформацій ґрунту в наволодренній зоні // Вісн. УДАВГ. – Рівне, 1998. – Вип. 1, ч. 2. Гідротехнічне будівництво. – С. 31–35.

7. Хлапук М. М. Математичне моделювання взаємовпливових процесів фільтрації і механічної суфозії // Там само. – Рівне, 1997. – Вип. 1, ч. 2. Гідротехнічне будівництво. – С. 66–69.
8. Поляков В. Л. Установившийся приток к дренажу в несвязном грунте с локально-упорядоченной структурой // Доп. НАН України. – 2013. – № 2. – С. 57–64.
9. Желызко В. В. Плоская установившаяся напорная фильтрация в несвязном несупфозионном грунте // Пробл. водопостачання, водовідведення та гідравліки. – Київ: КНУБА, 2010. – Вип. 13. – С. 143–147.

Інститут гідромеханіки НАН України, Київ

Поступило в редакцію 17.07.2013

**В. Л. Поляков**

### **До оцінки ефекту упорядкування структури незв'язного ґрунту при нестабільній напорній плоскій фільтрації**

*Знайдено аналітичними методами і обґрунтовано наближений розв'язок нестационарної задачі плоскої напірної фільтрації на її початковій стадії в однорідному незв'язному недеформованому ґрунті. На його основі одержано вираз для профіля відносного коефіцієнта фільтрації ґрунту, частинки скелету якого протягом цієї стадії встигли переорієнтуватися вздовж потоку. Виконано оцінку наслідків вказаного ефекту для усталеного фільтраційного режиму при швидкоплинному і тривалому характері розвитку деформацій на прикладі лінійного досконалого водоприймача.*

**V. L. Polyakov**

### **On the estimation of the cohesiveless soil structure ordering at a non-steady head plane groundwater flow**

*An approximate solution to the non-steady problem of a plane head groundwater flow is obtained and substantiated by analytical methods for the initial stage. On its basis, an expression is found for the relative hydraulic conductivity profile with regard for the reorientation of non-spherical structural particles along the flow by the end of the stage. Consequences of the deformation effect under steady-state conditions at fast and slow soil transformations in case of a linear perfect water intake are estimated.*



УДК 533.1;538.94

А. В. Бабич

## Скрытая симметрия уравнений магнитной гидродинамики и инвариантные решения

*(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины В. Ф. Клепиковым)*

*Рассмотрена групповая структура уравнений магнитной гидродинамики. Для двухмерного случая с помощью скрытой конформной симметрии построены классы инвариантных решений. Исследованы соответствующие течения.*

Одной из наиболее активно развивающихся областей современной физики является физика двухмерных систем. Связано это, с одной стороны, с уникальными свойствами двухмерного пространства, а с другой — с возможными перспективами технологического применения двухмерных систем. Уникальные свойства двухмерного пространства состоят в значительно более широкой, чем в пространствах большей размерности, допускаемой группой, симметрии. Именно с этим связан тот факт, что многие двухмерные задачи являются точно решаемыми, в отличие от своих многомерных аналогов [1]. Теоретическое исследование физики двухмерных систем ведется на протяжении многих десятилетий, среди наиболее важных достижений в этой области стоит отметить: точное решение двухмерной модели Изинга [2], послужившее одним из важных шагов в создании современной теории фазовых переходов; классификация двухмерных конформных теорий поля [3]. Активный рост числа экспериментальных работ, посвященных физике двухмерных систем, начался после открытия квантового эффекта Холла (сначала целочисленного, затем квантового) [4, 5]. В последнее время интерес к физике двухмерных систем значительно возрос в связи созданием графена и с возможными перспективами его технологического применения. Данная работа посвящена исследованию групповых свойств уравнений магнитной гидродинамики. Особое внимание уделяется двухмерному случаю.

**Групповая структура и скрытая симметрия уравнений магнитной гидродинамики.** Если проводящая жидкая (или газообразная) среда находится в магнитном поле, то при ее гидродинамических движениях в ней индуцируются электрические поля и возникают электрические токи. Но на токи в магнитном поле действуют силы, которые могут существенно повлиять на движение жидкости. В то же время эти токи меняют само магнитное

---

© А. В. Бабич, 2014



поле. Таким образом, возникает сложная картина взаимодействия магнитных и гидродинамических явлений, которая рассматривается на основе совместной системы уравнений поля и уравнений движения жидкости.

В область применения магнитной гидродинамики входят очень разнообразные физические объекты — от жидких металлов до космической плазмы. Для буквального применения магнитной гидродинамики необходимо рассмотрение характерных расстояний и промежуточных времени, которые велики по сравнению с длиной пробега и временем пробега носителей тока (электронов, ионов).

В нашей работе рассматривается система, в которой магнитная проницаемость мало отличается от единицы. Запишем уравнения магнитной гидродинамики для случая, когда можно пренебречь всеми диссипативными процессами — для идеальной жидкости. Это значит, что не учитываются процессы вязкости и теплопроводности, а также конечность электрической проводимости среды  $\sigma$ . Соответствующая система уравнений выглядит следующим образом [6]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = \text{rot}[\vec{v}\vec{H}], \\ \text{div} \vec{H} = 0, \\ \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)\vec{v} = -\frac{1}{\rho}\nabla p - \frac{1}{4\pi\rho}[\vec{H} \text{ rot} \vec{H}], \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)\rho + \text{div}(\vec{v}) = 0, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)p + \rho c^2 \text{div}(\vec{v}) = 0, \end{array} \right. \quad (1)$$

где  $\rho c^2$  рассматривается как заданная функция переменных  $p, \rho$ .

Система уравнений (1) инвариантна относительно группы преобразований Галилея, которая состоит из переносов, вращений и галилеевых переносов. В случае политропного газа, т. е. для  $\rho c^2 = \gamma p$ , где  $\gamma$  представляет собой произвольную константу, система (1) становится инвариантной относительно масштабных преобразований [7].

В работе [7] показано, что уравнения, описывающие идеальный газ, в случае, когда  $\gamma$  связано с размерностью пространства  $n$  выражением  $\gamma = (n + 2)/n$ , что соответствует одноатомному политропному газу, обладают дополнительной конформной симметрией.

Наличие этой симметрии делает возможным построение классов инвариантных решений [8]. Помимо этого, именно с наличием этой скрытой симметрии связана аналогия между уравнениями двумерной гидродинамики, уравнениями “мелкой воды” и уравнениями, описывающими двумерный электронный газ в полевом транзисторе [9, 10].

В случае магнитной гидродинамики уравнения (1) также допускают скрытую симметрию. Преобразования для этой симметрии в случае плоского слоя жидкости и магнитного поля, направленного перпендикулярно слою, выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} t' &= \frac{t}{1 - at}, & x'_i &= \frac{x_i}{1 - at}, \\ v'_i &= v_i + a(x_i - tv_i), \\ \rho' &= \rho(1 - at)^2, & p' &= p(1 - at)^4, \\ H' &= H(1 - at)^2. \end{aligned} \quad (2)$$

Наличие дополнительной симметрии (2) позволяет построить некоторые точные инвариантные решения уравнений (1). При построении инвариантных решений возникает система дифференциальных уравнений, число независимых переменных равно рангу искомого решения. В данной работе строится решение ранга 1. При этом возникает система обыкновенных дифференциальных уравнений, что значительно облегчает задачу интегрирования, в то же время решения ранга 1 обладают достаточной общностью и описывают целый класс течений газа. В нашем случае для построения решений ранга 1 надо рассматривать подгруппу размерности 2.

Для такой подгруппы подходит подгруппа с генераторами  $X_{12}$ ,  $X_+ + X_0$ , где  $X_0$  — оператор, соответствующий переносу по времени, а  $X_{12}$  — вращение вокруг оси  $Z$ . Генераторы этих групп выглядят так:

$$\begin{aligned} X_+ &= t^2 \frac{\partial}{\partial t} + tx^i \frac{\partial}{\partial x^i} + (x^i - tv^i) \frac{\partial}{\partial v^i} - 2t\rho \frac{\partial}{\partial \rho} - 4tp \frac{\partial}{\partial p} - 2tH \frac{\partial}{\partial H}, \\ X_0 &= \frac{\partial}{\partial t}, \\ X_{12} &= y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} + v_y \frac{\partial}{\partial v_x} - v_x \frac{\partial}{\partial v_y}. \end{aligned} \quad (3)$$

Для построения инвариантных решений удобно перейти к цилиндрическим координатам, в которых исходная система уравнений (1) выглядит следующим образом:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial t} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv_r H) - \frac{1}{r} \frac{\partial v_\phi H}{\partial \phi}, \\ \frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\phi}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} + \frac{v_\phi^2}{r} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{H}{4\pi\rho} \frac{\partial H}{\partial r} &= 0, \\ \frac{\partial v_\phi}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_\phi}{\partial r} + \frac{v_\phi}{r} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} + \frac{v_\phi v_r}{r} + \frac{1}{\rho r} \frac{\partial p}{\partial \phi} + \frac{H}{4\pi\rho r} \frac{\partial H}{\partial \phi} &= 0, \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + v_r \frac{\partial \rho}{\partial r} + \frac{v_\phi}{r} \frac{\partial \rho}{\partial \phi} + \rho \left( \frac{1}{r} \frac{\partial (rv_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} \right) &= 0, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + v_r \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{v_\phi}{r} \frac{\partial p}{\partial \phi} + 2p \left( \frac{1}{r} \frac{\partial (rv_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} \right) &= 0. \end{aligned} \right. \quad (4)$$

В этой системе сразу учтено уравнение  $\text{div } \vec{H} = 0$  и то, что скорость, давление и плотность не являются функциями от  $z$ . В цилиндрических координатах генераторы  $X_{12}$ ,  $X_+ + X_0$  запишутся в виде

$$\left\{ \begin{aligned} X_{12} &= -\frac{\partial}{\partial \phi}, \\ X_+ + X_0 &= (1+t^2) \frac{\partial}{\partial t} + tr \frac{\partial}{\partial r} + (r - tv_r) \frac{\partial}{\partial v_r} - tv_\phi \frac{\partial}{\partial v_\phi} - 2t\rho \frac{\partial}{\partial \rho} - 4tp \frac{\partial}{\partial p} - 2tH \frac{\partial}{\partial H}. \end{aligned} \right. \quad (5)$$

Базис инвариантов состоит из шести функционально независимых решений системы, который находится из системы уравнений

$$\left\{ \begin{aligned} X_{12} J &= 0, \\ X_0 J + X_+ J &= 0. \end{aligned} \right. \quad (6)$$

Из первого уравнения системы (6) видно, что  $J \neq J(\varphi)$ , т. е. решения, инвариантные относительно рассматриваемой подгруппы, не зависят от полярного угла. Решениями второго уравнения являются первые интегралы характеристической системы уравнений

$$\frac{dt}{1+t^2} = \frac{dr}{tr} = \frac{dv_r}{r-tv_r} = -\frac{dv_\phi}{tv_\phi} = -\frac{d\rho}{2t\rho} = -\frac{dp}{4tp} = -\frac{dH}{2tH}, \quad (7)$$

которые нетрудно найти, и они записываются в следующем виде:

$$\begin{aligned} J_1 &= \frac{r}{(1+t^2)^{1/2}}, & J_2 &= \frac{tr^2}{(1+t^2)^2} - rv_r, & J_3 &= rv_\phi, & J_4 &= \rho(1+t^2), \\ J_5 &= p(1+t^2)^2, & J_6 &= h(1+t^2). \end{aligned} \quad (8)$$

Инвариантные решения выглядят таким образом:

$$\Phi_\alpha(J_1, J_2, J_3, J_4, J_5, J_6) = 0, \quad (9)$$

где  $\alpha = 1, 2, \dots, 6$ .

Используя эти уравнения, можно выразить  $J_2, J_3, J_4, J_5, J_6$  через  $\lambda = J_1$ , а затем переписать решения в явном виде:

$$\begin{aligned} v_r &= \frac{tr}{1+t^2} + \frac{U(\lambda)}{r}, & v_\phi &= \frac{V(\lambda)}{r}, \\ \rho &= \frac{R(\lambda)}{1+t^2}, & p &= \frac{P(\lambda)}{(1+t^2)^2}, & H &= \frac{h(\lambda)}{(1+t^2)}. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь  $U, V, P, R, h$  — функции от  $\lambda$ , для нахождения которых необходимо подставить выражения (10) в исходную систему уравнений, переписанную в полярных координатах (4), не забывая об отсутствии зависимости от полярного угла. После несложных преобразований получаем следующую систему дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} UU'\lambda - V^2 - U^2 + \lambda^3 \frac{P' + \frac{hh'}{4\pi}}{R} + \lambda^4 = 0, \\ UV' = 0, \\ (Uh)' = 0, \\ (UR)' = 0, \\ UP' + 2PU' = 0. \end{cases} \quad (11)$$

**Анализ решений уравнений двумерной магнитной гидродинамики.** Нетрудно заметить, что в системе (11) целесообразно выделить два класса решений:

- 1)  $U = 0$ ,
- 2)  $U \neq 0$ .

В случае, когда функция  $U$  тождественно равна нулю, имеет смысл только первое уравнение системы (11). Это уравнение легко интегрируется, и мы получаем следующее частное решение для магнитогидродинамических уравнений:

$$P + \frac{h^2}{8\pi} = \int (V^2(\lambda) - \lambda^4)R(\lambda) \frac{d\lambda}{\lambda^3} + \text{const.} \quad (12)$$

Обозначим через  $P_H$  величину, в которую входит внешнее давление  $P$  и магнитное давление  $h^2/(8\pi)$ . В частном случае, когда  $V = \lambda^2$ , полученное решение описывает растекание слоя жидкости или газа произвольной плотности, вращающегося как твердое тело со скоростью  $v_\varphi = r/(1+t^2)$  под действием  $P_H$ . Условие  $V = \lambda^2$  приводит к тому, что все подынтегральное выражение (12) обращается в нуль, и мы получаем, что со временем величина  $P_H$  остается неизменной. Решение задачи дается формулами

$$v_r = \frac{tr}{1+t^2}, \quad v_\varphi = \frac{r}{1+t^2}. \quad (13)$$

Плотность в такой системе может быть произвольной.

Также для случая, когда  $U$  тождественно равно нулю, интересно выделить еще один класс решений, когда функция  $R$  представляет собой постоянную величину  $R_0$ , не зависящую от параметра  $\lambda$ . В этом случае уравнение (12) упрощается и принимает вид:

$$P_H = R_0 \int V^2(\lambda) \frac{d\lambda}{\lambda^3} - \frac{R_0}{2} \lambda^2 + \text{const}. \quad (14)$$

Для случая, когда наша жидкость или газ вращается как твердое тело, в качестве функции  $V$  необходимо взять  $V = b\lambda^2$ , где  $b$  представляет собой константу. В этом случае получаем решение в следующем виде:

$$\begin{aligned} v_r &= \frac{tr}{1+t^2}, & v_\phi &= \frac{br}{1+t^2}, \\ \rho &= \frac{R_0}{1+t^2}, \\ P_H &= \frac{R_0 \lambda^2}{2} (b-1) + \text{const}. \end{aligned} \quad (15)$$

Не менее интересен случай, когда  $V = \alpha\lambda$ . Такое решение имеет вид:

$$\begin{aligned} v_r &= \frac{tr}{1+t^2}, & v_\varphi &= \frac{\alpha}{\sqrt{1+t^2}}, & \rho &= \frac{R_0}{1+t^2}, \\ P_H &= R_0 \left( \text{const} - \frac{r^2}{2(1+t^2)} + \alpha^2 \ln \frac{r}{\sqrt{1+t^2}} \right). \end{aligned} \quad (16)$$

Соответствующее решение легко анализируется. Оно описывает движение кольцеобразно распределенной массы жидкости или газа с заданной начальной угловой скоростью  $\omega = \alpha/r$ . При растекании жидкости или газа под действием сил тяжести, магнитного поля и вращения угловая скорость убывает по формуле  $\omega = \alpha/(r\sqrt{1+t^2})$ .

Для случая  $U \neq 0$  уравнения 2–5 системы (11) легко интегрируются, после чего функции  $V$ ,  $P$ ,  $R$ ,  $h$  выражаются через функцию  $U$ :

$$R = \frac{C_1}{U}, \quad h = \frac{C_2}{U}, \quad P = \frac{C_3}{U^2}, \quad V = C_4. \quad (17)$$

Подставляя полученные функции в первое уравнение

$$UU'\lambda - V^2 - U^2 + \lambda^3 \frac{P' + \frac{hh'}{4\pi}}{R} + \lambda^4 = 0,$$

приходим к дифференциальному уравнению для функции  $U$ , которое легко интегрируется. После интегрирования получаем алгебраическое уравнение для функции  $U$ :

$$U^3 + (\lambda^4 + 2C\lambda^2 + V^2)U + A\lambda^2 = 0, \quad (18)$$

где  $A = 2 \left( \frac{2C_3}{C_1} + \frac{C_2}{4\pi C_1} \right)$ ,  $C$  — константа интегрирования. Все константы определяются из начальных условий. В итоге система дифференциальных уравнений свелась к алгебраическому уравнению третьей степени. Учитывая физические ограничения на константы интегрирования, можно показать, что данное кубическое уравнение может иметь только один действительный корень.

Анализируя полученное решение (18), покажем, что они описывают распространение кольца жидкости с заданными начальными радиусами  $r_{10}$  и  $r_{20}$ , а также с заданной циркуляцией скорости, равной  $2\pi V$ . Границы кольца определяются уравнениями

$$r_1 = r_{10}\sqrt{1+t^2}, \quad r_2 = r_{20}\sqrt{1+t^2}, \quad (19)$$

где  $r_{10}$  и  $r_{20}$  представляют собой границы слоя в начальный момент времени. В зависимости от знака константы  $A$  полученные решения будут описывать либо слой уплотнения, либо слой разрежения. Если  $A > 0$ , то на внешней границе давление скачком уменьшается, а на внутренней — увеличивается. Противоположная картина наблюдается при  $A < 0$ .

Таким образом, по аналогии с уравнениями обычной гидродинамики уравнения магнитной гидродинамики при определенных условиях обладают дополнительной скрытой симметрией. Наличие такой симметрии позволяет строить классы точных решений, описывающие различные типы течений.

1. Поляков А. М. Калибровочные поля и струны. — Ижевск: Изд. Удмуртского ун-та, 1999. — 313 с.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Ч. 1. Изд. 5-е. — Москва: Физматлит, 2005. — 616 с.
3. Belavin A. A., Polyakov A. M., Zamolodchikov A. B. Infinite conformal symmetry in two-dimensional quantum field theory // Nucl. Phys. B. — 1984. — **241**(2). — P. 333–380.
4. Панкратов О. А. Двухмерные системы: физика и новые приборы // Усп. физ. науки. — 1987. — **152**. — С. 720–721.
5. Шикин В. Б. Дробный квантовый эффект Холла // Там же. — 1989. — **159**. — С. 185–187.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. — Москва: Наука, 1982. — 624 с.
7. Овсянников Л. В. Лекции по основам газовой динамики. — Москва; Ижевск: Ин-т компьютерных исследований, 2003. — 336 с.
8. Ибрагимов Н. Ч. Группы преобразований в математической физике. — Москва: Наука, 1983. — 280 с.
9. Бабич А. В., Клепиков В. Ф., Щелоковский П. А. Скрытая симметрия уравнений газовой динамики и “мелкой воды” // Вісн. Харків. нац. ун-ту. Сер. фізична. Ядра, частинки, поля. — 2001. — **541**, вип. 4. — С. 68–72.
10. Dyakonov M., Shur M. Shallow water analogy for a ballistic field effect transistor: New mechanism of plasma wave generation by dc current // Phys. Rev. Lett. — 1993. — **71**. — С. 2465–2468.

**А. В. Бабіч**

**Прихована симетрія рівнянь магнітної гідродинаміки і інваріантні розв'язки**

*Розглянуто групову структуру рівнянь магнітної гідродинаміки. Для двовимірного випадку за допомогою прихованої конформної симетрії побудовано деякі класи інваріантних розв'язків. Досліджено відповідні течії.*

**A. V. Babich**

**A hidden symmetry of the magnetohydrodynamical equations and invariant solutions**

*The group structure of the magnetohydrodynamical equations is considered. Some classes of invariant solutions are constructed with help of the hidden conformal symmetry. The corresponding flows are studied.*

Є. П. Мамуня, В. В. Левченко, G. Voiteux,  
академік НАН України Є. В. Лебедєв

## Перколяційні ефекти провідності в полімерних нанокомпозитах з бінарним наповнювачем

*Досліджуються електрофізичні властивості полімерних систем на основі поліпропілену (ПП) і бінарного наповнювача – вуглецевих нанотрубок (ВНТ) та наночастинок нікелю (Ni). Композити з нанотрубками (ПП/ВНТ) були провідними зі значенням порога перколяції  $\varphi_c = 0,7\%$  (об.), тоді як композити з нанонікелем (ПП/Ni) не мали провідності. Додавання нанонікелю в композити ПП/ВНТ знижує поріг перколяції до  $\varphi_c = 0,2\%$  (об.) і значно збільшує провідність. Ці зміни пояснюються виникненням бріджинг-ефекту, коли кластери нанотрубок з'єднуються кластерами нанометалу, що підтверджується даними електронної мікроскопії.*

Останнім часом великий інтерес викликає створення полімерних нанокомпозитів на основі термопластичних та термореактивних полімерів, які вміщують нанорозмірні металеві наповнювачі [1]. Це обумовлено тим, що такі системи можуть проявляти фізико-механічні характеристики, притаманні полімерному компоненту, і, в той же час, мати особливі електрофізичні характеристики завдяки присутності наночастинок металу, зокрема, електропровідність. Однак отримання електропровідних композицій в цьому випадку потребує високого вмісту металевих частинок, які можуть утворити провідний кластер [2], що негативно впливає на механічні і реологічні властивості композита. З іншого боку, якщо як електропровідний наповнювач використовувати вуглецеві нанотрубки (ВНТ), можна отримати провідні властивості при їх надзвичайно малому вмісті в композиті. Так, мінімальна величина перколяційного порогу  $\varphi_c$  при спеціальних умовах формування композитів може досягати 0,002–0,005% (об.) [3, 4], хоча звичайно в термопластичних матрицях при змішуванні в розплаві  $\varphi_c = 1,0$ –1,5% (об.) [5]. Структура провідної фази, яка утворена вуглецевими нанотрубками, характеризується розгалуженою провідною сіткою, що і забезпечує низьке значення перколяційного порога [6].

З іншого боку, мала кількість провідного наноаповнювача веде до низької величини питомої провідності композиції. Тому перспективним шляхом отримання композицій з низьким порогом перколяції і високою електропровідністю є комбінування вуглецевих нанотрубок і металевого наноаповнювача. Одним з способів сполучення нанометалу і нанотрубок є формування ВНТ, декорованих наночастинами металу. Такі гібридні металвуглецеві наповнювачі проявляють нові електричні властивості, не притаманні чистим вуглецевим нанотрубкам [7–9]. Якщо ж вводити в полімер нанотрубки і нанометалевий наповнювач окремо, то при вмісті нанотрубок нижче порога перколяції додавання нанометалу може приводити до виникнення провідності, коли наночастинки металу з'єднують нанотрубки у провідну сітку. В такий спосіб за допомогою бінарного наповнювача можна отримати досить високу провідність композиції при низькій величині порога перколяції.

Композиції готували з поліпропілену (ПП) виробництва Hostalen, багатостінних вуглецевих нанотрубок (ВНТ) і наночастинок нікелю, які були отримані шляхом розкладання порошку формиату нікелю  $\text{Ni}(\text{COOH})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ , методом змішування наповнювача з розпла-

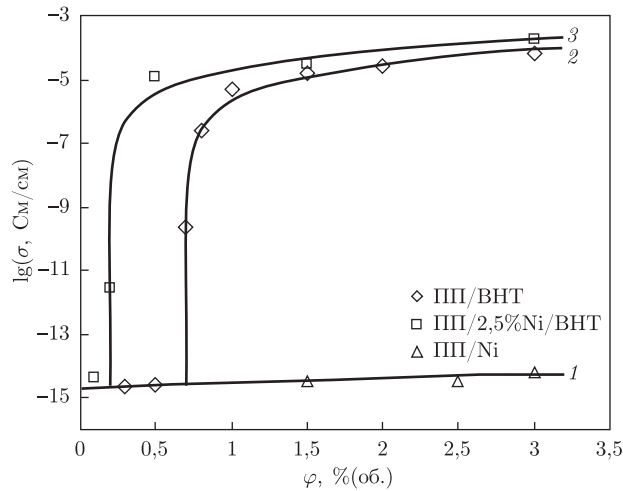


Рис. 1. Перколяційні залежності провідності композицій: 1 — поліпропілен, наповнений нанонікелем (ПП/Ні); 2 — наповнений нанотрубками (ПП/ВНТ); 3 — наповнений бінарним наповнювачем (ПП/Ні/ВНТ). Точки — експериментальні значення, лінії — розрахунок за рівнянням перколяції (1)

вом полімеру в двошнековому міні-екструдері Micro 15 Twin-Screw DSM. Нанотрубки мали зовнішній діаметр  $D$  близько 12–20 нм, а їх довжина  $L$  становила близько десятків мікрометрів, в результаті чого співвідношення  $L/D$  дорівнювало 100–1000. Середній розмір отриманих наночастинок нікелю становив 60 нм. Концентрація  $\varphi$  ВНТ в композиціях ПП/ВНТ і ПП/Ні/ВНТ варіювалася в діапазоні від 0,1 до 3% (об.). Вміст нанонікелю  $\varphi$  в композиціях ПП/Ні був у межах 3% (об.), а в композиціях з бінарним наповнювачем ПП/Ні/ВНТ становив постійну величину 2,5% (об.).

Електропровідність зразків вимірювалася на постійному струмі двоелектродною схемою за допомогою тераомметра Е6–13 А. Значення електропровідності  $\sigma$  (См/см) обраховували із співвідношення

$$\sigma = \frac{1}{R} \frac{l}{S},$$

де  $R$  (ом) — опір зразка, виміряний тераомметром;  $l$  (см) — товщина зразка;  $S$  (см<sup>2</sup>) — площа зразка.

Дослідження процесів плавлення і кристалізації проводилися на обладнанні TA Instruments DSC Q2000. Зразки нагрівалися до температури від 25 до 200 °С в атмосфері азоту зі сталою швидкістю нагріву 10 °С/хв, витримувалися при 200 °С протягом однієї хвилини і далі охолоджувалися до 25 °С з такою ж швидкістю, як і при нагріві.

На рис. 1 показана залежність електропровідності для композицій ПП з нанонікелем (пряма 1), нанотрубками (крива 2) та бінарним наповнювачем Ні/ВНТ (крива 3). Видно, що композиції, наповнені ВНТ, проявляють перколяційну поведінку, при цьому величина порогу перколяції  $\varphi_c = 0,7\%$  (об.). В той же час композиції, що містять нанонікель, є непровідними в усьому діапазоні досліджуваних концентрацій. Однак у системі з бінарним наповнювачем величина перколяційного порогу значно менша, а саме,  $\varphi_c = 0,2\%$  (об.). Крім того, величина провідності в системі ПП/Ні/ВНТ перевищує провідність композицій ПП/ВНТ в чотири рази при 1,5% (об.) і в два рази при 3% (об.) вмісту нанотрубок, тобто нанонікель надає додаткову провідність, хоча сам перебуває в непровідному стані.



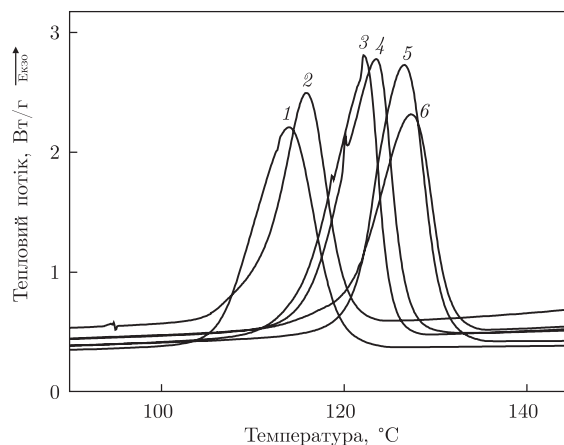


Рис. 2. Піки кристалізації чистого ПП та композицій ПП/ВНТ, ПП/Ні, ПП/Ні/ВНТ з різним вмістом наповнювача:

1 – ПП; 2 – ПП/2,5Ni; 3 – ПП/0,5ВНТ/2,5Ni; 4 – ПП/0,5ВНТ; 5 – ПП/1,5ВНТ; 6 – ПП/1,5ВНТ/2,5Ni

Розрахунок провідності, згідно з перколяційним рівнянням, має вигляд

$$\sigma = \sigma_0(\varphi - \varphi_c)^t, \quad (1)$$

де  $\sigma_0$  – параметр, що має розмірність провідності;  $t$  – критичний індекс. Розрахункова залежність наведена на рис. 1 і демонструє добру узгодженість з експериментальними даними. Критичний індекс  $t \approx 1,8$  для обох систем, тобто має значення, яке збігається з теоретичною величиною  $t_{\text{теор}} = 1,7-2,0$ , що свідчить про статистичний розподіл вузлів у провідній сітці, сформованій нанотрубками. Низький поріг перколяції в композиціях ПП/ВНТ обумовлений високою анізотропією розмірів нанотрубок, в яких відношення довжина/діаметр становить  $\sim 1000$ . При умові рівномірного розподілу по об'єму полімерної матриці нанотрубки формують розгалужену сітку і для утворення безперервного провідного кластера досить невеликого вмісту ВНТ.

Зниження порога перколяції в присутності бінарного наповнювача можна пояснити двома причинами. По-перше, частинки нанонікелю можуть розміщуватися між нанотрубками і утворювати провідні містки між ними (так званий бріджинг-ефект), що створює умови для формування провідного кластера при значно меншій концентрації нанотрубок. По-друге, можливо частинки нанонікелю впливають на структуроутворення і формування морфологічної структури в полімерній матриці, що змінює просторовий розподіл нанотрубок, збільшуючи їх локальну концентрацію в окремих областях. Це сприяє утворенню провідного кластера.

Аналіз процесів плавлення і кристалізації дає можливість прояснити вплив наноаповнювачів на структуроутворення в полімерній матриці. Як видно з рис. 2, температури кристалізації  $T_k$  всіх композицій зсунуті до більш високих температур порівняно з чистим ПП, що демонструє роль поверхні наповнювачів як центрів кристалізації, внаслідок чого процес кристалізації починається раніше, ніж в ненаповненому ПП в процесі охолодження розплаву. З даних щодо температур плавлення і кристалізації, наведених в табл. 1, випливає, що введення нанотрубок в ПП істотно не впливає на температуру плавлення  $T_m$ , тоді як спостерігається значна відмінність у температурах кристалізації  $T_k$  чистого ПП і наповнених систем. Тобто процес кристалізації є більш чутливим, ніж плавлення до наявності

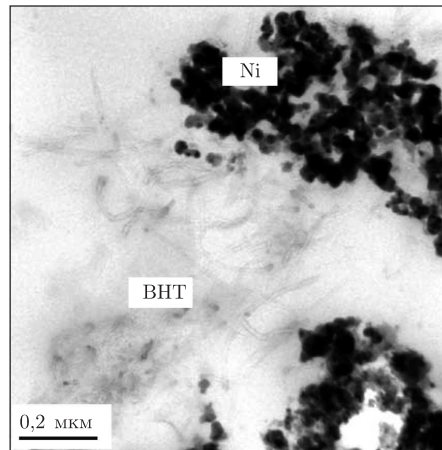


Рис. 3. Електронно-мікроскопічне зображення структури композиції ПП/Ni/ВНТ

включень, які впливають на формування кристалічної структури. Такий же ефект відзначається в роботі [10].

Інтервал між температурами плавлення і кристалізації, що визначається як температура переохолодження  $\Delta T = T_n - T_k$ , яка зумовлена кінетикою кристалізації, а саме, співвідношенням між швидкостями кристалізації та охолодження матеріалу в процесі вимірювання. Оскільки швидкість охолодження однакова для всіх композитів, то зміна  $\Delta T$  визначатиметься швидкістю кристалізації. Присутність наповнювачів прискорює процес кристалізації, тому значення  $\Delta T$  нижче для наповнених систем порівняно з чистим ПП. Для композитів ПП/ВНТ та ПП/Ni/ВНТ із зростанням вмісту ВНТ (від 0,5 до 1,5% (об.)), значення  $\Delta T$  зменшується (на  $\sim 7^\circ\text{C}$ ), що вказує на підсилення процесу нуклеації ВНТ у кристалізаційному процесі. Головним фактором є те, що як температури кристалізації, так і температури переохолодження є майже ідентичними для систем ПП/ВНТ і ПП/Ni/ВНТ з однаковим вмістом нанотрубок, тобто присутність добавки нанонікелю не впливає на кристалізаційні процеси в полімерній матриці, яка містить нанотрубки. Звідси випливає, що процеси структуроутворення в системі ПП/Ni/ВНТ з бінарним наповнювачем не змінюють просторового розподілу нанотрубок, отже не впливають на провідність, а ефект зменшення перколяційного порога провідних композицій ПП/ВНТ добавками нанонікелю обумовлений виключно бріджинг-ефектом. Автори [11] також спостерігали зменшення порога перколяції в присутності частинок срібла в композиціях, наповнених нанотрубками.

Результати структурних досліджень методом електронної мікроскопії наведено на рис. 3. В полімерній матриці видно присутність нікелевих агрегатів, які розподілені між агре-

Таблиця 1. Температури плавлення і кристалізації для композицій ПП/Ni, ПП/ВНТ і ПП/Ni/ВНТ

Композиція	$T_k, ^\circ\text{C}$	$\Delta T = T_n - T_k$	$T_n, ^\circ\text{C}$
ПП	113,9	52,8	166,7
ПП/2,5Ni	115,9	44,4	160,3
ПП/0,5ВНТ	123,5	43,5	167,0
ПП/0,5ВНТ/ 2,5Ni	122,1	44,8	166,9
ПП/1,5ВНТ	126,6	36,8	163,4
ПП/1,5ВНТ/2,5Ni	127,3	37,2	164,5

Примітка. Цифри біля позначень компонентів означають їх вміст у композиції в % (об.).

гатами нанотрубок і контактують з ними, тобто ці дані підтверджують наявність бріджинг-ефекту.

Таким чином, добавки нанометалів в полімерні системи, які містять вуглецеві нанотрубки, істотно знижують величину перколяційного порога і підвищують електропровідність композицій внаслідок прояву бріджинг-ефекту.

1. *Помогайло А. Д., Розенберг А. С., Уфлянд И. Е.* Наночастицы металлов в полимерах. – Москва: Химия, 2000. – 672 с.
2. *Mamunya Ye. P., Muzychenko Yu. V., Pissis P. et al.* Percolation phenomena in polymers containing dispersed iron // *Polymer. Eng. Sci.* – 2002. – **42**, No 1. – P. 90–100.
3. *Sandler J. K. W., Kirk J. E., Kinloch I. A. et al.* Ultra-low electrical percolation threshold in carbon-nanotube-epoxy composites // *Polymer.* – 2003. – **44**. – P. 5893–5899.
4. *Mamunya Ye. P., Lebovka N. I., Lisunova M. O. et al.* Conductive polymer composites with ultralow percolation threshold containing carbon nanotubes // *J. Nanostr. Polym. Nanocomp.* – 2008. – **4**, No 1. – P. 21–27.
5. *Potschke P., Dudkin S. M., Alig I.* Dielectric spectroscopy on melt processed polycarbonate-multiwalled carbon nanotube composites // *Polymer.* – 2003. – **44**. – P. 5023–5030.
6. *Мамуня Є. П., Юрженко М. В., Лебедев Є. В. та ін.* Електроактивні полімерні матеріали. – Київ: Альфареклама, 2013. – 398 с.
7. *Georgakilas V., Gournis D., Tzitzios V. et al.* Decorating carbon nanotubes with metal or semiconductor nanoparticles // *J. Mater. Chem.* – 2007. – **17**. – P. 2679–2694.
8. *Guo D. J., Li H. L.* Highly dispersed Ag nanoparticles on functional MWNT surfaces for methanol oxidation in alkaline solution // *Carbon.* – 2005. – **43**. – P. 1259–1264.
9. *Luo J., Xing Y., Zhu J. et al.* Structure and electrical properties of Ni nanowire/multiwalled carbon nanotube/amorphous carbon nanotube heterojunctions // *Adv. Funct. Mater.* – 2006. – **16**. – P. 1081–1085.
10. *Seo M.-K., Lee J.-R., Park S.-J.* Crystallization kinetics and interfacial behaviors of polypropylene composites reinforced with multi-walled carbon nanotubes // *Mater. Sci. Eng.* – 2005. – **A404**. – P. 79–84.
11. *Liang G. D., Bao S. P., Tjong S. C.* Microstructure and properties of polypropylene composites filled with silver and carbon nanotube nanoparticles prepared by melt-compounding // *Mater. Sci. Eng.* – 2007. – **B142**. – P. 55–61.

*Інститут хімії високомолекулярних сполук  
НАН України, Київ*

*Надійшло до редакції 15.08.2013*

**Е. П. Мамуня, В. В. Левченко, G. Voiteux,**  
академик НАН України **Е. В. Лебедев**

### **Перколяционные эффекты проводимости в полимерных наноккомпозитах с бинарным наполнителем**

*Исследуются электрофизические свойства полимерных систем на основе полипропилена (ПП) и бинарного наполнителя – углеродных нанотрубок (УНТ) и наночастиц никеля (Ni). Композиты с нанотрубками (ПП/ВНТ) были проводящими со значением порога перколяции  $\varphi_c = 0,7\%$  (об.), тогда как композиты с наноникелем (ПП/Ni) не имели проводимости. Добавление наноникеля в композиты ПП/УНТ снижает порог перколяции до  $\varphi_c = 0,2\%$  (об.) и существенно увеличивает проводимость. Эти изменения объясняются возникновением бріджинг-эффекта, когда кластеры нанотрубок соединяются кластерами нанометалла, что подтверждается данными электронной микроскопии.*

**Ye. P. Mamunya, V. V. Levchenko, G. Boiteux,**  
Academician of the NAS of Ukraine **E. V. Lebedev**

**Percolation effects of conductivity in polymer nanocomposites filled with a binary filler**

*Electrophysical properties of polymer systems based on polypropylene (PP) and the binary filler, carbon nanotubes (CNTs) and nanoparticles of nickel (Ni), are investigated. Composites with nanotubes (PP/CNTs) were conductive with the value of percolation threshold equal to  $\varphi_c = 0.7$  vol.%, while the composites with nanonickel (PP/Ni) are not conductive. The addition of nanonickel in composites PP/CNTs reduces the percolation threshold to  $\varphi_c = 0.2$  vol.% and significantly increases the conductivity. These changes are explained by the emergence of the bridging effect, where the clusters of nanotubes are connected by the clusters of the nanometal, which is confirmed by electron microscopy.*

Є. Ю. Таран, В. А. Каліон, Р. Я. Кондрат

## Реологічна модель розведеного розчину недеформівних вільнопротічних ланцюгових макромолекул

(Представлено академіком НАН України Л. А. Булавіним)

Отримано реологічні рівняння стану розведених розчинів недеформівних ланцюгових макромолекул у ньютонівському розчиннику. «Перлинне намисто» Сайто використовується як гідродинамічна модель макромолекул. Для виведення визначальних рівнянь напруженого стану в розчинах застосовується структурно-феноменологічний підхід. Поведінка таких розчинів у простій зсувній течії вивчається за допомогою одержаної реологічної моделі.

У даній роботі отримано визначальні рівняння для напруження в розведених розчинах недеформівних ланцюгових макромолекул полімерів з ньютонівськими розчинниками за допомогою структурно-феноменологічного підходу [1]. Макромолекули розчинів, що вивчаються, мають, здавалося б, дві суперечливі якості — вони проникні для розчинника і мають високий ступінь жорсткості. До таких макромолекул відносяться макромолекули целюлози та деяких її похідних — наприклад, тринітроцелюлози та етилцелюлози [2]. Підвищена жорсткість цих макромолекул ґрунтується на специфічних взаємодіях різної природи між ланками їх молекулярних ланцюгів [2].

Для гідродинамічного моделювання таких ланцюгових макромолекул у даній роботі використовується недеформівний “складаний метр” (або “перлинне намисто”) Сайто [3, 4], недеформівне у градієнтних течіях розчину.

Одержані визначальні рівняння для напруження у розчинах використовуються у даній роботі для вивчення їх реологічної поведінки у простій зсувній течії.

**Динаміка макромолекул. Зсувна в'язкість розведеного розчину.** “Складаний метр” Сайто [3, 4], який використовується для гідродинамічного моделювання недеформівних ланцюгових молекул у даній роботі, складається з  $2n + 1$  однакових бусинок, які пронумеровані від  $-n$  до  $n$  та з'єднані в жорстку систему за допомогою  $2n$  векторів зв'язку однакової довжини.

При цьому недеформівні макромолекули характеризуються величинами  $R$ ,  $P$ ,  $Q$  ( $P = Q$ ) [3]

$$R = \sum_{k=-n}^{+n} \rho_k^2, \quad P = \sum_{k=-n}^{+n} \eta_k^2, \quad Q = \sum_{k=-n}^{+n} \varsigma_k^2,$$

де  $(\rho, \eta, \varsigma)$  — координати  $k$ -ї бусинки модельної макромолекули в системі координат  $O\rho\eta\varsigma$ , яка зв'язана з головними осями інерції макромолекули.

Вибираючи початок лабораторної системи координат  $Oxyz$  (рис. 1) у центрі мас такої модельної макромолекули, Сайто [3] показав, що у наближенні Стокса рівняння руху недеформівного намиста у простій зсувній течії розчинника

$$v_x = Ky, \quad v_y = 0, \quad v_z = 0, \quad K = \text{const} \quad (1)$$

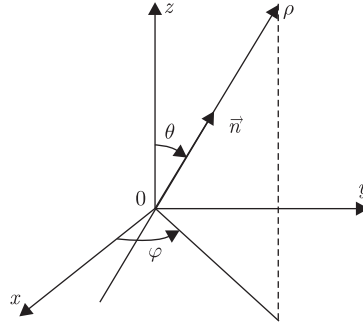


Рис. 1. Лабораторна система координат, початок якої збігається з центром мас модельної макромолекули

без урахування внутрішньомолекулярної гідродинамічної взаємодії та теплового ротаційного руху мають вигляд

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{K}{2} \left( 1 + \frac{R-P}{R+P} \cos 2\varphi \right), \quad \frac{d\theta}{dt} = \frac{K}{4} \frac{R-P}{R+P} \sin 2\varphi \sin 2\theta. \quad (2)$$

У рівняннях (2)  $\varphi$  і  $\theta$  — азимутальний і широтний кути, які характеризують кутове положення осі  $O\rho$  у системі координат  $Oxyz$  (рис. 1);  $t$  — час.

Обчислення швидкості дисипації механічної енергії в одиниці об'єму розведеного розчину недеформівних ланцюгових вільнопротічних макромолекул дозволило Сайто [4] отримати вираз для ефективної в'язкості  $\mu_a^\perp$  такого розчину в течії (1)

$$\begin{aligned} \mu_a^\perp = & \mu_0 \left( 1 + n_0 \frac{\xi P}{2\mu_0} \right) + 3n_0 \xi (R-P) D_r \frac{\langle \sin 2\varphi \sin^2 \theta \rangle}{2K} + \\ & + \frac{1}{4} n_0 \xi \frac{(R-P)^2}{R+P} \langle \sin^2 2\varphi \sin^4 \theta \rangle + n_0 \xi \frac{P(R-P)}{R+P} \langle \sin^2 \theta \rangle, \end{aligned} \quad (3)$$

де  $D_r$  — коефіцієнт обертальної броунівської дифузії недеформівного вільнопротічного наміста,

$$D_r = \frac{kT}{\xi(R+P)}; \quad (4)$$

$\mu_0$  — в'язкість розчинника;  $n_0$  — кількість молекул розчиненого полімеру в одиниці об'єму розчину;  $\xi$  — стоксівський коефіцієнт поступального тертя у розчиннику бусинок наміста, яке моделює недеформівну макромолекулу;  $k$  — стала Больцмана;  $T$  — абсолютна температура; кутові дужки  $\langle \rangle$  означають осереднення у просторі можливих орієнтацій зважених недеформівних макромолекул.

У роботах [3, 4] враховується вплив обертального броунівського руху на ефективну в'язкість розведеного розчину недеформівних макромолекул, що розглядається.

Осереднення у (3) здійснюється [4] за допомогою функції розподілу  $F(\varphi, \theta)$  орієнтацій макромолекул за кутовими положеннями, яка визначається [3] з рівняння обертальної дифузії

$$D_r \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial F}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 F}{\partial \varphi^2} \right] = \text{div}(\vec{\omega} F), \quad (5)$$

де  $\vec{\omega} = \{d\varphi/dt, d\theta/dt\}$  — вектор кутової швидкості макромолекули, координати якої визначаються співвідношеннями (2).

**Структурно-феноменологічне моделювання реологічної поведінки розведених розчинів недеформівних ланцюгових макромолекул.** Рівняння (2)–(5) та результати роботи [1] свідчать про те, що для виведення загальної математичної моделі реологічної поведінки розведеного розчину макромолекул Сайто такий розчин слід моделювати структурним континуумом з єдиним внутрішнім мікропараметром — одиничним вектором  $n_i$ , який характеризує орієнтацію недеформівної макромолекули:

$$n_x = \cos \varphi \sin \theta, \quad n_y = \sin \varphi \sin \theta, \quad n_z = \cos \theta. \quad (6)$$

За методикою структурно-феноменологічного вивчення розчинів полімерів [1] у ньютонівському розчиннику з в'язкістю  $\mu_0$ , визначальне рівняння для тензора напруження  $T_{ij}$  у градієнтних течіях розведених розчинів недеформівних ланцюгових макромолекул слід шукати у вигляді

$$T_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\mu d_{ij} + \mu_1 \left( \langle n_i n_j \rangle - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right) + \mu_2 d_{km} \langle n_k n_m n_i n_j \rangle + 2\mu_3 (d_{jk} \langle n_k n_i \rangle + d_{ik} \langle n_k n_j \rangle). \quad (7)$$

Структурно-феноменологічне рівняння, яке визначає обертальний рух зважених недеформівних макромолекул Сайто під дією гідродинамічних сил потоку, повинно мати вигляд [1]

$$\frac{dv_i}{dt} = \omega_{ik} n_k + \Lambda (d_{ik} n_k - d_{km} n_k n_m n_i). \quad (8)$$

У рівняннях (7), (8)  $p$  — тиск у ньютонівському розчиннику;  $d_{ij}$  — тензор швидкостей деформації,  $d_{ij} = 1/2(v_{i,j} + v_{j,i})$ , де  $v_{i,j}$  — тензор градієнта швидкості, кома в індексах означає диференціювання у напрямку координатної осі, яка позначена індексом, що йде за комою;  $\omega_{ik}$  — тензор вихору швидкості,  $\omega_{ik} = (1/2)(v_{i,k} - v_{k,i})$ ;  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера;  $\mu$ ,  $\mu_1$ ,  $\mu_2$ ,  $\mu_3$ ,  $\Lambda$  — феноменологічні сталі, які потребують визначення.

Кутові дужки  $\langle \rangle$  у (7) означають осереднення у просторі орієнтацій вектора  $n_i$  за допомогою функції розподілу  $F$ , яка є розв'язком рівняння [1]

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial n_i} \left( F \frac{\partial n_i}{\partial t} \right) = D_r \left( \Delta F - 2n_k \frac{\partial F}{\partial n_k} + n_k n_m \frac{\partial^2 F}{\partial n_k \partial n_m} \right). \quad (9)$$

У (9)  $D_r$  — коефіцієнт обертальної броунівської дифузії недеформівної макромолекули Сайто, визначений співвідношенням (4);  $\Delta$  — оператор Лапласа.

При структурно-феноменологічному вивченні розведеного розчину недеформівних макромолекул, який розглядається, феноменологічні сталі  $\mu$ ,  $\mu_1$ ,  $\mu_2$ ,  $\mu_3$ ,  $\Lambda$  визначальних рівнянь (7), (8) знаходяться за допомогою результатів структурної (мікромасштабної) теорії. Так, порівняння рівнянь, які отримуються із (8) для течії (1) з урахуванням (6),

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{K}{2}(1 + \Lambda \cos 2\varphi), \quad \frac{d\theta}{dt} = K \Lambda \sin \theta \cos \theta \sin \varphi \cos \varphi$$

з рівняннями руху (2), одержаними Сайто [3], дозволяє отримати сталу  $\Lambda$ :

$$\Lambda = \frac{R - P}{R + P}. \quad (10)$$

При цьому рівняння динаміки недеформівної ланцюгової макромолекули Сайто (8) у довільній градієнтній течії без врахування теплового ротаційного руху набуває вигляду

$$\frac{dn_i}{dt} = \omega_{ik}n_k + \frac{R - P}{R + P}(d_{ik}n_k - d_{km}n_kn_mn_i). \quad (11)$$

Феноменологічні сталі  $\mu$ ,  $\mu_1$ ,  $\mu_2$ ,  $\mu_3$  реологічного рівняння (7) знаходяться з порівняння зсувної в'язкості, яка отримується за допомогою (7) для течії (1)

$$\mu_a^\perp = \frac{T_{xy}}{K} = \mu + \mu_1 \frac{\langle \sin 2\varphi \sin^2 \theta \rangle}{2K} + \mu_2 \frac{\langle \sin^2 2\varphi \sin^4 \theta \rangle}{4} + \mu_3 \langle \sin^2 \theta \rangle,$$

з виразом (3) для ефективної зсувної в'язкості розведеного розчину недеформівних ланцюгових макромолекул Сайто, який знайдено в рамках структурного підходу [4]. При цьому

$$\begin{aligned} \mu &= \mu_0 \left( 1 + n_0 \frac{\xi P}{2\mu_0} \right), & \mu_1 &= 3n_0 \xi (R - P) D_r, \\ \mu_2 &= n_0 \xi \frac{(R - P)^2}{R + P}, & \mu_3 &= n_0 \xi \frac{P(R - P)}{2(R + P)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Підстановка (12) у (7) дозволяє записати остаточний вигляд тензора напружень у розведеному розчині недеформівних ланцюгових макромолекул Сайто у ньютонівській рідині

$$\begin{aligned} T_{ij} &= -p\delta_{ij} + 2\mu_0 \left( 1 + n_0 \frac{\xi P}{2\mu_0} \right) d_{ij} + 3n_0 \xi (R - P) D_r \left( \langle n_i n_j \rangle - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right) + \\ &+ n_0 \xi \frac{(R - P)^2}{R + P} d_{km} \langle n_k n_m n_i n_j \rangle + n_0 \xi \frac{P(R - P)}{2(R + P)} (d_{ik} \langle n_k n_j \rangle + d_{jk} \langle n_k n_i \rangle). \end{aligned} \quad (13)$$

Осереднення у (13) здійснюється за допомогою функції розподілу орієнтацій макромолекул за кутовими положеннями, яка визначається згідно з (9), (11) як розв'язок рівняння

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial n_i} \left\{ \left[ \omega_{ik}n_k + \frac{R - P}{R + P} (d_{ik}n_k - d_{km}n_kn_mn_i) \right] F \right\} = \\ = D_r \left( \Delta F - 2n_k \frac{\partial F}{\partial n_k} + n_k n_m \frac{\partial^2 F}{\partial n_k \partial n_m} \right). \end{aligned} \quad (14)$$

**Реологічна поведінка розчину.** Реологічне рівняння стану (13) дозволяє досліджувати реологічну поведінку розведених розчинів недеформівних ланцюгових макромолекул Сайто в довільних градієнтних течіях. У даному розділі це рівняння використовується для вивчення простої зсувної течії (1) такого розчину. Функція розподілу орієнтацій макромолекул за кутовими положеннями  $F(\varphi, \theta)$  у простій зсувній течії (1), яка необхідна при



визначенні осереднюваних величин у (13), задовольняє рівняння (5), яке є частинним випадком рівняння (14) для течії (1). Підстановка компонентів вектора кутової швидкості  $\vec{\omega} = \{d\varphi/dt, d\theta/dt\}$ , які визначаються рівняннями (2), у (5) перетворює його на рівняння

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2 F}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial F}{\partial \theta} \right) = \alpha \left[ \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{R-P}{R+P} \cos 2\varphi \right) \frac{\partial F}{\partial \varphi} + \frac{1}{4} \frac{R-P}{R+P} \sin 2\theta \sin 2\varphi \sin \theta \frac{\partial F}{\partial \theta} - \frac{1}{2} \frac{R-P}{R+P} \sin 2\varphi (3 \sin^3 \theta - 2 \sin \theta + 2) F \right], \quad (15)$$

де  $\alpha = K/D_r$ .

Розв'язок рівняння (15) знаходиться у вигляді подвійного ряду

$$F(\varphi, \theta) = \sum_{j=0}^{\infty} \left( \frac{R-P}{R+P} \right)^j \left[ \frac{1}{2} \sum_{n=0}^j a_{n0,j} P_{2n}(\cos \theta) + \sum_{n=1}^j \sum_{m=1}^n (a_{nm,j} \cos 2m\varphi + b_{nm,j} \sin 2m\varphi) P_{2n}^{2m}(\cos \theta) \right], \quad (16)$$

де  $P_{2n}(\cos \theta)$  — многочлени Лежандра;  $P_{2n}^{2m}(\cos \theta)$  — приєднані функції Лежандра. Для коефіцієнтів  $a_{n0,j}$ ,  $a_{nm,j}$ ,  $b_{nm,j}$  отримано [5] рекурентні співвідношення, які дозволяють визначити функцію розподілу  $F$  з довільним ступенем точності.

Мікροхарактеристики  $R$ ,  $P$ ,  $\xi$  модельної макромолекули Сайто в роботі виражаються через параметри  $a$  і  $p_0$ , які характеризують геометрію еліпсоїда обертання, гідродинамічно еквівалентного молекулярному намисту. Для цього використовуються рівності

$$\frac{R-P}{R+P} = \frac{p_0^2 - 1}{p_0^2 + 1}, \quad (17)$$

$$W_{\text{mol}} = W_e. \quad (18)$$

Рівність (17) одержується з (6) з урахуванням (7). Рівність (18) впливає з припущення, що коефіцієнт обертального тертя  $W_{\text{mol}}$  недеформівної макромолекули Сайто [3] дорівнює коефіцієнту обертального тертя  $W_e$  еквівалентного еліпсоїда у ньютонівському розчиннику з в'язкістю  $\mu_0$  [2].

Виконуючи осереднення у співвідношеннях, які визначають компоненти напруження  $T_{xy}$ ,  $T_{xx}$ ,  $T_{yy}$ ,  $T_{zz}$  у простій зсувній течії (1) розчину, з використанням трьох перших членів розвинення (16) для функції розподілу  $F(\varphi, \theta)$  отримаємо залежності приведенного інкременту ефективної зсувньої в'язкості  $\mu_a^\perp \equiv T_{xy}/K$  розчину та різниць нормальних напружень  $\sigma_1 \equiv T_{yy} - T_{zz}$  і  $\sigma_2 \equiv T_{xx} - T_{zz}$  у ньому від  $\alpha$  (рис. 2, 3). Тут  $\mu_a^\perp(0) = \mu_a^\perp|_{\alpha=0}$ ;  $\phi$  — об'ємна концентрація макромолекул у розчині.

Таким чином, застосування структурно-феноменологічного методу дозволило отримати у даній роботі реологічну модель розведених розчинів недеформівних ланцюгових макромолекул з ньютонівськими розчинниками. Визначальні рівняння побудованої моделі використовуються для дослідження реологічної поведінки таких розчинів у простій зсувній течії.

Проведені розрахунки свідчать, що розведені розчини, які вивчаються у роботі, виявляють псевдопластичну залежність ефективної в'язкості  $\mu_a^\perp$  розчину від швидкості зсуву  $K$

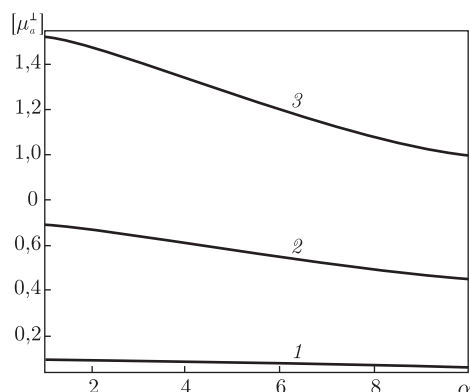


Рис. 2. Залежність  $[\mu_a^\perp]$  розведеного розчину у ньютонівському розчиннику недеформівних ланцюгових макромолекул від  $\alpha = K/Dr$ . Криві 1, 2, 3 відповідають значенням  $p_0 = 2, 4, 6$

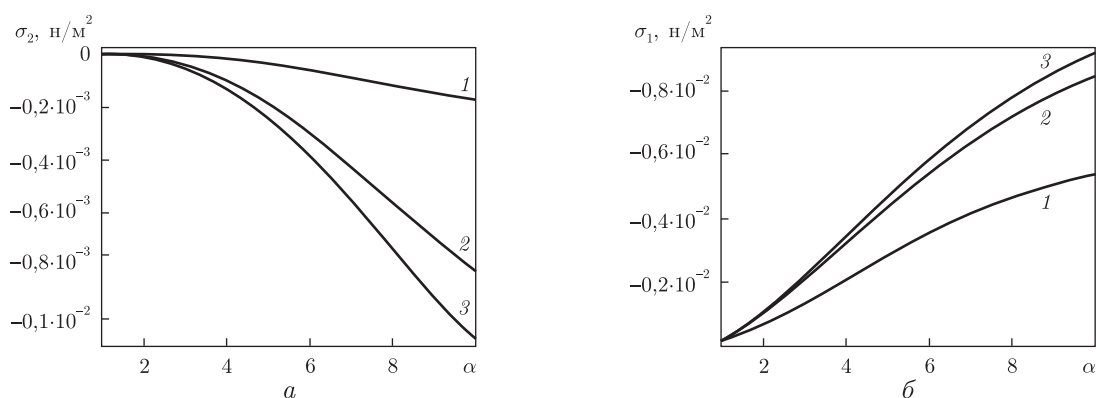


Рис. 3. Залежності  $\sigma_1$  і  $\sigma_2$  в розведеному розчині ( $\phi = 0,01$ ) при абсолютній температурі  $T = 293K$  недеформівних ланцюгових макромолекул з ефективним радіусом  $r = 10^{-7}$  м від  $\alpha = K/Dr$ . Криві 1, 2, 3 відповідають значенням  $p_0 = 2, 4, 6$

(рис. 2) — вона зменшується зі збільшенням  $K$ . Обчислення показують також, що розведені розчини недеформівних ланцюгових макромолекул виявляють ефект Вайссенберга, про що свідчить наявність ненульових різниць нормальних напружень  $\sigma_1$  і  $\sigma_2$  (рис. 3). Для розчинів, що розглядаються у роботі, цей ефект є результатом сумісної дії на зважені макромолекули як гідродинамічних сил, так і броунівського руху. Числові значення для  $[\mu_a^\perp]$ ,  $\sigma_1$  і  $\sigma_2$  отримані вперше.

1. Таран Е. Ю. Структурно-феноменологическая реология разбавленных суспензий: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.02.05. — Харьков, 1994. — 346 с.
2. Цветков В. Н., Эскин В. Е., Френкель С. Я. Структура макромолекул в растворах. — Москва: Наука, 1964. — 720 с.
3. Saito N. Viscosity of high polymer solutions. II. Rigid skein model // J. Phys. Soc. Japan. — 1949. — 4. — P. 85–88.
4. Saito N. The effect of the Brownian motion on the viscosity of solutions of macromolecules. II. Rigid chain molecules // Ibid. — 1951. — 6, No 2. — P. 302–314.
5. Peterlin A. Über die Viskosität von verdunnen Lösungen und Suspensionen in Abhängigkeit von Teilchenform // Z. Physik. — 1938. — 111. — P. 232–244.

Київський національний університет  
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 03.06.2013

Е. Ю. Таран, В. А. Калион, Р. Я. Кондрат

**Реологическая модель разбавленного раствора недеформируемых свободнопротекаемых цепных макромолекул**

*Получены реологические уравнения состояния разбавленных растворов недеформируемых цепных макромолекул в ньютоновском растворителе. В качестве гидродинамической модели макромолекул используется “жемчужное ожерелье” Сайто. Для получения определяющих уравнений напряженного состояния в растворах применяется структурно-континуальный подход. Поведение таких растворов в простом сдвиговом течении изучается при помощи полученной реологической модели.*

E. Yu. Taran, V. A. Kalion, R. Ya. Kondrat

**A rheological model of dilute suspension of undeformable free-drained chain macromolecules**

*A the rheological equations of state of the dilute solutions of undeformable chain macromolecules in a Newtonian solvent are obtained. The Saito pearl necklace is used as a hydrodynamical model of macromolecules. The structure-phenomenological approach is used to obtain the constitutive equations of a stressed state in solutions. The behavior of such solutions in a simple shearing flow is studied by the derived rheological model.*



УДК 621.762.

**Н. В. Бошицкая, Н. Ф. Кущевская, Г. А. Баглюк, В. Я. Куровский,  
Д. А. Гончарук**

**Сравнительная характеристика нанопорошков  
на основе железа, полученных низкотемпературным  
синтезом из оксалатов и цитратов**

*(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины П. И. Лободой)*

*Проведено сравнительное исследование нанодисперсных порошков, полученных разложением солей оксалата и цитрата железа в диапазоне температур 250–450 °С и их восстановлением в среде водорода и модифицированной методики дальнейшей пролонгированной пассивации поверхности полученного порошка железа путем контролируемого замещения защитной среды водорода воздушной смесью в течение 5–8 часов. Показано, что фазовый состав полученных нанопорошков железа существенно зависит от состава исходной шихты: при разложении цитрата железа при 400–450 °С получен нанопорошок  $\alpha$ -Fe, при разложении оксалата железа при тех же температурах — смесь  $\alpha$ -Fe и Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>. Средний размер полученных порошков составляет ~100 нм.*

В последние годы все большее применение в медицине — в качестве магнитной основы для переноса ряда лекарственных препаратов — находят композиционные наноразмерные магнитные порошковые материалы. Несомненным преимуществом использования таких композиционных лекарственных систем является поддержание надлежащего уровня локальных концентраций терапевтических препаратов в зоне поражения в условиях существенного снижения объема их общего дозирования и уменьшение эффектов побочного действия на организм человека в целом.

Порошки, пригодные для их использования в медицинских целях, должны иметь необходимый комплекс физико-химических свойств: высокую дисперсность и магнитные характеристики, а также непирофорность и гидрофильность [1]. Анализ имеющихся в литературе данных позволяет выделить три группы магнитных порошковых материалов на основе железа:

$\alpha$ -Fe, среди которого чистым является карбонильное железо, содержащее 0,0007% углерода и 0,01% кислорода. Однако степень дисперсности карбонильного железа (1–3 мкм) недостаточно высока, и это ограничивает сферу его применения в биомедицине. Чистым

---

© Н. В. Бошицкая, Н. Ф. Кущевская, Г. А. Баглюк, В. Я. Куровский, Д. А. Гончарук, 2014

нанодисперсным порошком с размером частиц 30–80 Å является коллоидное железо, но такой размер частиц находится в области, ниже критической, и материал на его основе легко переходит в суперпарамагнитное состояние (что также сужает сферу его использования);

магнетит ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) и гематит ( $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ). Они имеют достаточно высокий уровень магнитных свойств и необходимую дисперсность, однако несколько уступают по магнитным характеристикам металлическим наночастицам на основе железа;

композиционные нанопорошки на основе железа, которые являются многофазными.

Целью данной работы является получение нанопорошков на основе железа различного фазового состава и дисперсности и сравнительная характеристика их физико-химических свойств, необходимых для использования в медицинской практике.

**Материалы и методы исследований.** Нанопорошки на основе железа получали низкотемпературным разложением/восстановлением в водороде оксалатных и цитратных солей железа в диапазоне температур 250–450 °С. В отличие от традиционных методов получения порошков железа путем термического разложения его солей [2] в работе для синтеза нанодисперсного порошка на основе железа использовалась комбинация метода разложения и восстановления цитратной и оксалатной солей железа в восстановительной среде водорода и модифицированной методики дальнейшей пролонгированной пассивации поверхности полученного порошка железа путем контролируемого замещения защитной среды водорода воздушной смесью в течение 5–8 часов.

После прекращения процесса выделения водорода железо, которое не прореагировало, удалялось фильтрованием. Полученные порошки цитрата и оксалата железа упаривались до момента начала процесса кристаллизации, охлаждались и высушивались в вакуум-эксикаторе до состояния постоянной массы. Разложение полученных солей железа проводилось в среде водорода в диапазоне температур 250–450 °С в специально сконструированном защитном герметичном муфеле, в котором обеспечивалось создание контролируемой газовой среды. Муфель оснащался специальной системой технологических форм в виде лодочек, в которых обеспечивалась возможность регулировать толщину и площадь слоев обрабатываемого порошка. Для предотвращения процесса воспламенения полученного порошка он охлаждался по методике пролонгированной продувки водородом, выдержки при комнатной температуре и последующей пассивации поверхности путем контролируемого постепенного замещения водорода на воздушную смесь. Потеря массы полученного порошка определялась взвешиванием до и после восстановления при температурах 250, 300, 325, 400 и 450 °С. Рентгеноструктурные исследования полученных порошков проводились с использованием рентгеновского дифрактометра ДРОН-3.0 в  $\text{Co K}_\alpha$ -излучении. Фазовый состав порошков определялся путем сравнения набора межплоскостных расстояний, рассчитанных по экспериментально записанной дифрактограмме с дифракционными данными, приведенными в соответствующих таблицах [3]. Количество найденных фаз определялось по соотношению интенсивных линий этих фаз на дифрактограммах. Размеры областей когерентного рассеяния ( $D_{\text{окр}}$ ) и, в частности, их диаметры вычисляли, исходя из расширения линий на дифрактограммах с использованием формулы Селякова–Шерера [4]. Магнитные характеристики полученных порошков — удельную намагниченность насыщения, остаточную индукцию, коэрцитивную силу — измеряли с использованием баллистического магнитометра в диапазоне полей до 800 кА/м при комнатной температуре [5].

Электронно-микроскопические исследования полученных порошков проводились с помощью сканирующего электронного микроскопа JSM6360LA, оснащенного системой рентгеноспектрального энергодисперсионного микроанализа JED-2200, с ускоряющим напря-

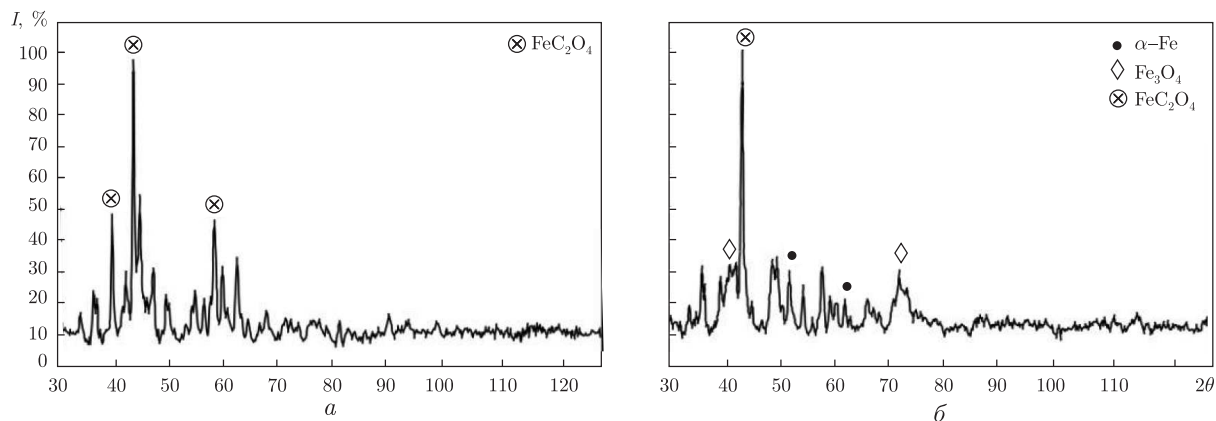


Рис. 1. Рентгенограммы порошков на основе железа, полученных в диапазоне 120–250 °С синтезом из: *а* — цитратных солей; *б* — оксалатных солей

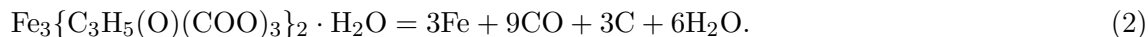
жением 15 кВ и диаметром электронного зонда 4 нм [6]. Для контроля фазового состава и дисперсности полученного порошка отбирались образцы синтезированного продукта при температурах 250, 300, 325, 400 и 450 °С.

**Результаты исследований и их обсуждение.** Литературные данные свидетельствуют о том, что разложение солей оксалата и цитрата железа происходит согласно реакциям [7]:

из солей оксалатов



из солей цитратов



При этом в зависимости от условий проведения эксперимента наряду с железом может образовываться и оксид FeO, нанопорошок которого также пирофорен. Считается, что первоначально образуется оксид металла, который частично восстанавливается угарным газом до металла [8].

Согласно данным рентгенофазового анализа порошков, полученных путем разложения/восстановления солей железа в водороде, показано, что порошки, синтезированные в диапазоне температур 120–250 °С из цитратных солей железа, содержат только кристаллическую фазу оксикарбида железа FeC<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (табл. 1). Порошки, полученные разложением оксалатных солей при тех же температурах, состоят из смеси фаз α-Fe, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (см. табл. 1).

На рис. 1 представлены рентгенограммы порошков на основе железа, полученных в диапазоне 120–250 °С синтезом из: *а* — цитратных солей; *б* — оксалатных солей.

С увеличением температуры синтеза происходит увеличение количества фазы α-Fe в полученных порошках. При этом в порошках, полученных синтезом из цитратных солей при температурах 400–450 °С, на дифрактограммах присутствуют только линии α-Fe (рис. 2, *а*, *б*), а для порошков, полученных из оксалатных солей, присутствуют наряду с линиями α-Fe также линии Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> в количестве 4–11% (мас.) (рис. 2, *в*, *г*).

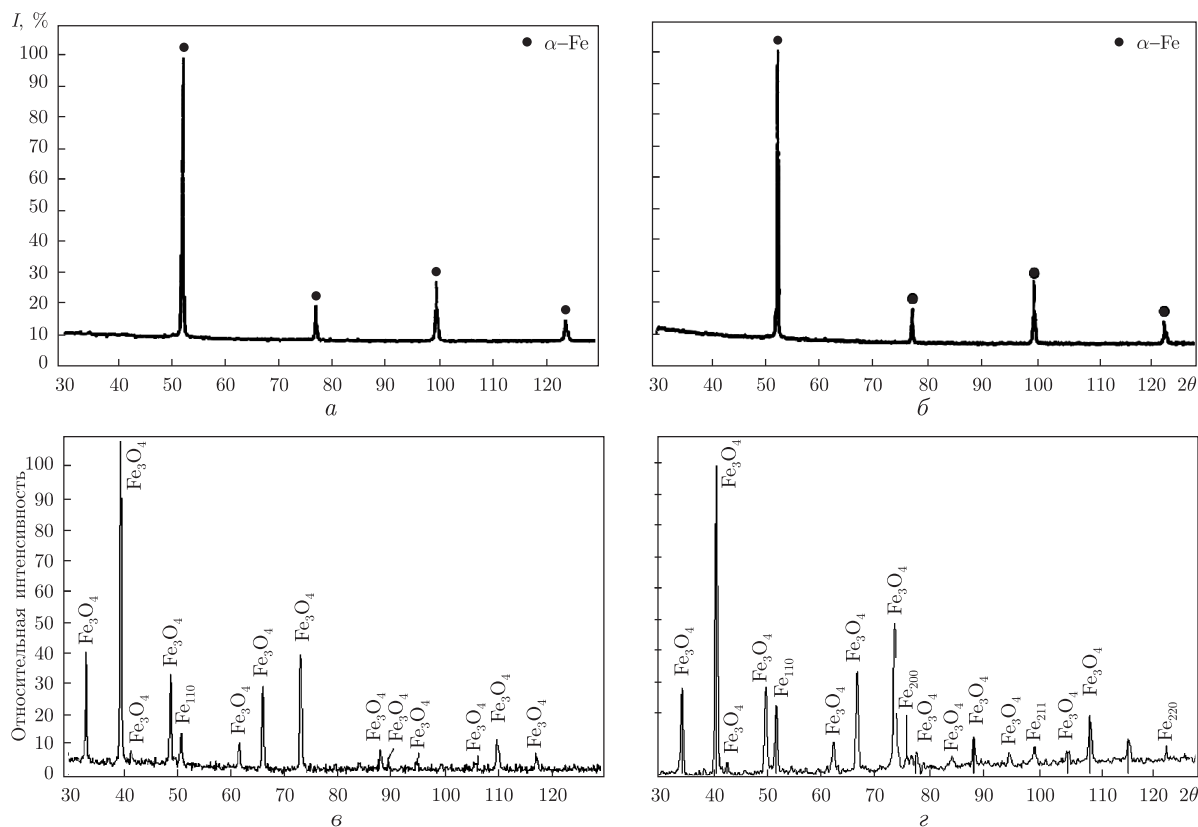


Рис. 2. Рентгенограммы нанопорошков на основе железа, полученных при 400–450 °С синтезом из: а, б — цитратов; в, г — оксалатов железа

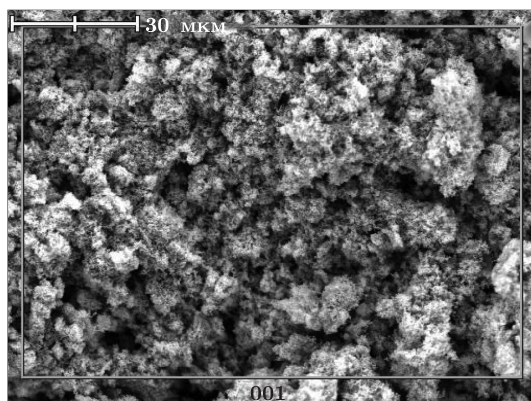


Рис. 3. Микрофотография порошка, полученного синтезом из солей цитратов железа при температуре 400 °С в водороде

Таким образом, при разложении солей цитратов железа при температуре 400 °С в водороде получен наноразмерный порошок чистого α-Fe, тогда как путем разложения при тех же условиях солей оксалата железа получается смесь α-Fe и Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>.

Проведенное электронномикроскопическое исследование полученного порошка α-Fe (рис. 3) показывает, что он достаточно однороден с развитой поверхностью, размерами

Таблица 1. Фазовый состав и области когерентного рассеяния порошков, синтезированных из цитратных и оксалатных солей железа

Температурный режим, °С	Фазовый состав	Содержание фаз, %	$D_{\text{окр}}$ , нм
Синтез из солей цитратов			
120–250	FeC <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	100	50
300	FeC <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	100	50
325	FeC <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	70	60
	$\alpha$ -Fe	10	50
	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	20	—
350	$\alpha$ -Fe	98	150
	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	2	—
400	$\alpha$ -Fe	100	160
450	$\alpha$ -Fe	100	100
Синтез из солей оксалатов			
120–250	$\alpha$ -Fe	5	270
	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	58	210
	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	37	75
300	$\alpha$ -Fe	18	270
	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	78	210
	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4	100
350	$\alpha$ -Fe	43	240
	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	57	210
400	$\alpha$ -Fe	89	220
	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	11	100
450	$\alpha$ -Fe	96	215
	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	4	90

некоторых структурных элементов, близкими к размерам  $D_{\text{окр}}$ , измеренных с помощью метода рентгенофазового анализа.

Таким образом, термическое разложение солей оксалата и цитрата железа в диапазоне температур 250–450 °С с пассивацией поверхности полученного порошка путем контролируемого постепенного замещения водорода на воздушную смесь позволяет получить нанопорошки на основе железа с размером частиц в диапазоне ~100 нм.

Фазовый состав полученных нанопорошков железа зависит от состава исходной шихты: при разложении цитрата железа при 400–450 °С получен нанопорошок  $\alpha$ -Fe, при разложении оксалата железа при тех же температурах — смесь  $\alpha$ -Fe и Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>.

Разложение солей цитрата железа при температуре 400 °С позволяет получить нанопорошок чистого  $\alpha$ -Fe.

1. Хенч Л. Л., Джонс Д. Биоматериалы, искусственные органы и инжиниринг тканей. – Москва: Техносфера, 2007. – 305 с.
2. Куцевська Н. Ф. Фізико-хімічні умови синтезу наноконпозиційних феромагнітних порошків для біомедичного використання. – Автореф. дис. ... д-ра техн. наук 05.16.06. – Київ: Ін-т колоїдної хімії і хімії води ім. А. В. Думанського НАН України, 2003. – 39 с.
3. Лиопо В. А., Гимпель Н. Н., Васильев Е. К. Рентгеновский фазовый анализ с использованием базы данных // Применение рентгеновских лучей в науке и технике. – Иркутск: ИГУ, 1995. – С. 125–131.
4. Горелик С. С., Скаков Ю. А., Расторгуев Л. Н. Рентгенографический и электронно-оптический анализ. – Москва: МИСиС, 1994. – 328 с.



5. Чечерников В. И. Магнитные измерения. – Москва: Изд-во Моск. ун-та, 1969. – 388 с.
6. Шиммель Г. Методика электронной микроскопии / Пер. с нем. – Москва, 1972. – Растровая электронная микроскопия и рентгеновский микроанализ / Пер. с англ. – Москва, 1984. – Т. 1–2.
7. Новинюк Л. В. Цитраты аммония-железа – эффективные источники биодоступного железа // Пищевые ингредиенты, сырье и добавки. – 2007. – № 1. – С. 40–43.
8. Ломаев С., Сюгаев А., Решетников С. и др. Влияние условий получения нанокристаллических порошков железа на их коррозионное поведение в нейтральных средах // Защита металлов. – 2007. – № 43. – С. 207–215.

Институт проблем материаловедения  
им. И.Н. Францевича НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 13.09.2013

**Н. В. Бошицька, Н. Ф. Кущевська, Г. А. Баглюк, В. Я. Куровський,  
Д. А. Гончарук**

### **Порівняльна характеристика нанопорошків на основі заліза, одержаних низькотемпературним синтезом із оксалатів та цитратів**

*Проведено порівняльне дослідження нанодисперсних порошків, отриманих розкладанням солей оксалату та цитрату заліза в діапазоні температур 250–450 °С та їх відновленням в середовищі водню і модифікованої методики подальшої пролонгованої пасивації поверхні отриманого порошку заліза шляхом контрольованого заміщення захисного середовища водню повітряною сумішшю протягом 5–8 годин. Показано, що фазовий склад одержаних нанопорошків заліза істотно залежить від складу вихідної шихти: при розкладанні цитрату заліза при 400–450 °С отримано нанопорошок  $\alpha$ -Fe, при розкладанні оксалату заліза при тих же температурах – суміш  $\alpha$ -Fe та  $Fe_3O_4$ . Середній розмір отриманих порошків становить  $\sim 100$  нм.*

**N. V. Boshitskaya, N. F. Kushchevskaya, G. A. Baglyuk, V. Ya. Kurovskii,  
D. A. Goncharuk**

### **Comparative characteristic of nanopowders on the basis of Fe obtained by the low-temperature synthesis from oxalates and citrates**

*A comparative investigation of nanopowders produced by the decomposition of oxalate and citrate salts of iron in the temperature range of 250–450 °C and their reduction in hydrogen and a modified method of subsequent prolonged passivation of the iron powder surface obtained by the controlled substitution of hydrogen protective atmosphere by air mixture over a period of 5–8 h is performed. It is shown that the phase composition of the obtained iron nanopowders significantly depends on the composition of the initial charge: at the decomposition of iron citrate at 400–450 °C,  $\alpha$ -Fe nanopowder was obtained, while the decomposition of iron oxalate at the same temperatures gave a mixture of  $\alpha$ -Fe and  $Fe_3O_4$ . The average size of the obtained powders is  $\sim 100$  nm.*



УДК 550.36

**В. В. Гордиенко, И. В. Гордиенко, О. В. Завгородняя**

## **Тепловое поле юго-восточной части Днепровского бассейна Днепровско-Донецкой впадины**

*(Представлено академиком НАН Украины В. И. Старостенко)*

*Проведен расчет глубинного теплового потока по данным из 182 скважин. Они сгруппированы в 104 пунктах. Полученное уплотнение сети ликвидирует некоторые “белые пятна” в изученности теплового потока юго-восточной части ДДВ. К юго-западному краевому разлому ДДВ приурочена цепочка положительных аномалий теплового потока, превышающих 50 мВт/м<sup>2</sup>. Вблизи центра региона аномальные тепловые потоки превышают 70 мВт/м<sup>2</sup>. Отрицательные аномалии теплового потока распространены в регионе заметно шире. Часть из них тяготеет к активизированным разломным зонам. Анализ данных и сопутствующей информации позволяет считать повышенные тепловые потоки следствием современной активизации.*

Несмотря на значительную плотность сети определений глубинного теплового потока (ТП) в пределах Днепровско-Донецкой впадины (ДДВ) [1] здесь все еще остается недостаточно проясненным вопрос о наличии возмущений теплового поля значительной площади. На основной части структуры (в Днепровском бассейне) до сих пор встречены почти исключительно локальные всплески ТП в отдельных скважинах, исчезающие на расстояниях порядка километра от них. Такие аномалии отмечают места гидротермального теплопереноса, в результате которого образуются, в частности, месторождения углеводородов. Разрозненность возмущений указывает на очень молодой возраст коровой части процесса современной активизации, в который составной частью входит упомянутый теплоперенос. Сама активизация подтверждается множеством негеотермических признаков, которые будут рассмотрены ниже. В данной же работе предпринята попытка дополнительного изучения теплового поля части Днепровского бассейна ДДВ для выявления аномалий теплового потока большего размера. Они могут быть истолкованы как указания на более зрелую стадию активизации.

Интерес (в том числе — и прагматический: имеется в виду районирование впадины по уровню нефтегазоносности) представляет и изучение простирания аномалий теплового потока. До сих пор продольные зоны наиболее интенсивной активизации в ДДВ выделялись только по негеотермическим признакам.

© В. В. Гордиенко, И. В. Гордиенко, О. В. Завгородняя, 2014

**Новые определения ТП.** Изучение теплового потока было проведено в скважинах в Талалаевско-Рыбальского, Рябухинско-Сев. Голубовского, Глинско-Солоховского, Машевско-Шебелинского и Руденковско-Пролетарского нефтегазоносных районов, т. е. в пределах наибольшего распространения месторождений углеводородов впадины. Юго-восточным ограничением района исследований принята окраина зоны перехода от ДДВ к Донбассу (табл. 1). Положение этой границы у разных авторов не совпадает [2], для наших целей удобно использовать в этом качестве Орехово-Павлоградский глубинный разлом, разделяющий территории с существенно разным тепловым полем.

Расчет теплового потока осуществлялся по данным о результатах измерений температуры потенциально продуктивных пластов в процессе испытаний скважин. Проведенный анализ позволил утверждать, что они не более искажены тепловыми эффектами бурения, чем используемые обычно авторами в районах нефтегазового бурения забойные температуры. Изучено возможное влияние на температуру дроссельного эффекта, возникающего при вскрытии газоносных пластов. Для этого сопоставлены результаты расчета ТП по интервалам глубин, где испытывались газо-, нефте- и водоносные образования повышенной пористости. Помеха значительной интенсивности не была обнаружена.

К рассмотрению привлечены архивные материалы каротажных экспедиций Мингео УССР (преимущественно — Балаклейской и Полтавской), они дополнены информацией из [3].

Тепловой поток определялся обычным образом — как произведение геотермического градиента на теплопроводность пород. Последняя устанавливалась в виде средней эффективной величины в больших интервалах глубин. Для ДДВ это многократно апробированная практика, дающая хорошие результаты. Средние величины теплопроводности определены по геологическим разрезам скважин и сведениям о теплопроводности пройденных ими пород разного возраста и литологии [1, 2]. Вариации теплопроводности находятся в пределах 10–15%, как правило, ее величины различаются не более 5–10%. Геотермический градиент устанавливался в виде среднего значения на базе между глубинной и приповерхностной точками. В качестве последней использовались данные многолетних измерений температуры на метеостанциях и в мелких скважинах (лишь часть из них располагалась внутри впадины, остальные — на склоне Воронежского массива и Украинского щита). Поскольку глубины измерений пластовых температур довольно значительны (500–5500 м, причем минимальные использовались редко и ни в одном из случаев применение температур, установленных на этих глубинах, не привело к расчету ТП, заметно отличного от полученных в других интервалах глубин), поверхностная температура была принята постоянной — 9 °С.

Перед вычислением геотермического градиента в измеренные температуры вносились поправки, учитывающие влияния палеоклимата и инфильтрации поверхностных вод с изменяющейся с глубиной интенсивностью [1]. Влияние структурного фактора в Днепровском бассейне (понижение ТП из-за экранирования мезокайнозойским чехлом относительно низкой теплопроводности) признано незначительным. Доказательством этому послужило сравнение расчетных ТП выше и ниже основной границы изменения теплопроводности пород. Расчет глубинного ТП проведен по данным, полученным в 182 скважинах на месторождении нефти и газа. Результаты представлены в табл. 1. Они сгруппированы в 104 пунктах. Определения теплового потока в прошлом выполнены на изучаемой территории примерно в 500 пунктах [2]. Получено не очень значительное уплотнение сети, однако с его помощью удастся ликвидировать некоторые “белые пятна” в изученности ТП бассейна, уточнить контуры изолиний теплового потока. Сравнение новых результатов определения ТП

с полученными в тех же скважинах ранее по другой методике (и, как правило, в другом интервале глубин) или в соседней скважине на той же структуре; рис. 1 показывает, что типичные различия составляют 2 мВт/м<sup>2</sup>. Погрешность определения каждой из методик не превышает 5%, особенно, если учесть очень существенные осреднения данных, выно-

Таблица 1. Новые определения теплового потока Земли в юго-восточной части Днепровского бассейна Днепро-Донецкой впадины

С. ш.	В. д.	ТП, мВт/м <sup>2</sup>	С. ш.	В. д.	ТП, мВт/м <sup>2</sup>	С. ш.	В. д.	ТП, мВт/м <sup>2</sup>	С. ш.	В. д.	ТП, мВт/м <sup>2</sup>
50°28'	34°04'	46	49°53'	35°07'	42	49°24'	34°48'	77	49°02'	35°01'	55
50°27'	34°03'	41	49°53'	35°13'	50	49°24'	34°49'	79	49°02'	35°03'	56
50°26'	34°04'	44	49°53'	34°16'	51	49°25'	34°48'	47	49°01'	35°01'	53
50°26'	34°05'	45	49°52'	35°12'	43	49°32'	34°18'	47	49°01'	35°02'	52
50°23'	34°07'	46	49°51'	34°23'	43	49°32'	34°20'	50	49°01'	35°09'	46
50°23'	34°15'	43	49°51'	34°24'	42	49°33'	34°19'	44	49°00'	35°02'	53
50°22'	34°08'	44	49°50'	34°24'	43	49°33'	34°47'	42	49°00'	35°04'	45
50°21'	34°07'	46	49°50'	34°25'	43	49°29'	34°17'	47	49°00'	35°03'	44
50°15'	34°26'	48	49°50'	35°07'	48	49°22'	34°07'	54	49°00'	35°05'	44
50°14'	34°19'	44	49°49'	35°06'	48	49°23'	34°07'	53	49°00'	35°09'	41
50°13'	34°25'	47	49°49'	34°35'	49	49°21'	34°07'	55	48°59'	35°10'	43
50°13'	34°26'	46	49°49'	34°36'	48	49°22'	34°08'	56	48°59'	35°16'	48
50°11'	35°06'	51	49°48'	34°34'	50	49°23'	34°13'	53	48°59'	35°04'	44
50°10'	34°41'	43	49°48'	34°35'	50	49°24'	34°13'	48	48°58'	35°09'	46
50°08'	34°51'	49	49°48'	35°13'	41	49°21'	34°23'	48	48°58'	35°10'	42
50°07'	34°22'	40	49°45'	34°42'	46	49°20'	34°12'	39	48°58'	35°05'	43
50°07'	34°42'	39	49°45'	35°14'	43	49°20'	35°21'	34	48°58'	35°04'	45
50°07'	34°43'	42	49°43'	34°45'	36	49°20'	34°13'	41	48°58'	35°16'	46
50°07'	34°49'	49	49°42'	34°45'	38	49°20'	34°23'	45	48°57'	35°10'	47
50°07'	34°50'	49	49°43'	34°46'	38	49°20'	34°24'	45	48°54'	35°18'	37
50°06'	34°40'	43	49°42'	34°11'	40	49°20'	34°42'	41	48°53'	35°18'	48
50°06'	34°41'	41	49°41'	34°11'	43	49°19'	35°22'	36	48°52'	35°18'	37
50°06'	34°42'	45	49°38'	34°09'	43	49°19'	35°37'	35	48°52'	35°19'	47
50°06'	34°43'	43	49°38'	34°21'	43	49°19'	34°13'	40	48°52'	35°24'	31
50°05'	34°41'	40	49°37'	34°17'	45	49°19'	34°11'	42	48°51'	35°24'	33
50°05'	34°42'	43	49°36'	34°17'	44	49°19'	34°42'	40	49°09'	34°42'	61
50°03'	35°04'	44	49°36'	34°18'	50	49°19'	34°12'	52	49°08'	34°44'	59
50°02'	34°30'	45	49°36'	34°20'	41	49°19'	34°41'	41	49°07'	34°43'	59
50°02'	35°09'	38	49°36'	35°02'	35	39°18'	34°11'	42	49°07'	34°44'	57
50°01'	35°09'	39	49°35'	35°02'	39	49°18'	34°12'	39	49°07'	34°59'	44
50°01'	34°28'	46	49°35'	35°03'	35	49°18'	34°42'	41	49°06'	34°43'	59
50°01'	34°29'	46	49°34'	35°15'	34	49°18'	34°43'	40	49°06'	34°44'	59
50°00'	34°28'	46	49°33'	35°10'	32	49°17'	35°02'	46	49°05'	34°53'	37
50°00'	35°08'	38	49°33'	35°15'	29	49°16'	35°02'	45	49°05'	34°48'	51
50°00'	34°30'	41	49°32'	35°11'	33	49°11'	34°38'	51	49°04'	34°43'	47
50°00'	34°31'	45	49°30'	35°23'	42	49°10'	34°38'	56	49°04'	34°47'	48
49°59'	35°16'	45	49°30'	35°31'	35	49°12'	34°37'	67	49°04'	34°53'	39
49°58'	35°16'	46	49°30'	35°32'	39	49°11'	34°45'	40	49°04'	34°58'	46
49°56'	34°47'	39	49°30'	35°36'	38	49°10'	34°46'	45	49°04'	34°59'	55
49°54'	34°56'	48	49°29'	35°31'	36	49°12'	34°51'	57	49°03'	34°53'	38
49°54'	34°03'	43	49°29'	35°36'	38	49°11'	34°51'	52	49°03'	34°45'	46
49°54'	34°15'	47	49°29'	35°47'	41	49°12'	34°50'	55	49°02'	34°45'	49
49°54'	35°07'	43	49°27'	35°39'	37	49°08'	34°42'	56	49°02'	34°44'	49
49°54'	35°08'	42	49°26'	35°39'	38	49°08'	34°41'	52	49°02'	35°02'	52
49°54'	35°13'	45	49°25'	35°47'	39						

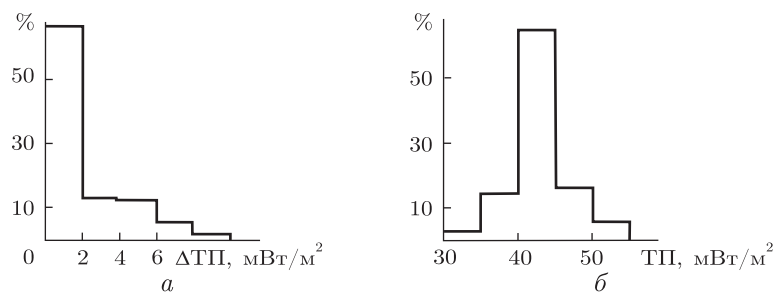


Рис. 1. Гистограммы: различий между значениями ТП (а), определенными по разным методикам (см. текст); распределения площадей с разными ТП в юго-восточной части Днепровского грабена (б)

симых на карту теплового потока региона. Изолинии теплового потока можно проводить через  $5 \text{ мВт/м}^2$ .

*Распределение значений теплового потока* в изучаемой части Днепровского бассейна лучше оценивать, используя характеристики, связанные с относительными площадями распространения значений ТП разного уровня, чем с количеством этих значений на территории региона. Именно так построена гистограмма на рис. 1.

Среднее значение теплового потока — около  $43 \text{ мВт/м}^2$  — типично для ДДВ и вообще для платформенной части территории Украины, включая Украинский щит. Т. е. значительные по площади положительные аномалии, во всяком случае, не распространены. Можно назвать только одну структуру в регионе, к которой явно приурочена цепочка положительных аномалий ТП. В их пределах его значение превышает  $50 \text{ мВт/м}^2$ . Это — юго-западный краевой разлом ДДВ (рис. 2). Среднее значение ТП в контурах изолиний  $50 \text{ мВт/м}^2$  составляет  $54\text{--}55 \text{ мВт/м}^2$ , в двух пунктах отмечены значения  $61\text{--}67 \text{ мВт/м}^2$ , т. е. имеется вполне достоверная аномалия, интенсивность которой может превышать  $20 \text{ мВт/м}^2$ . Это распространенная величина для зон современной активизации Украины [1].

За пределами этой цепочки возмущений аномалию, выделяемую изолинией  $50 \text{ мВт/м}^2$ , удастся оконтурить (т. е. получить повышенные значения ТП не менее, чем в трех пунктах) только в одном месте вблизи центра региона (см. рис. 2). Здесь максимальные ТП превышают  $70 \text{ мВт/м}^2$ .

Значение отрицательные аномалии ТП распространены в регионе заметно шире (см. рис. 1, 2). Часть из них тяготеет к активизированным разломным зонам. Можно предположить наличие аномальных перетоков подземных вод в этих зонах [5], которые не полностью учтены использованными поправками.

**Обсуждение результатов.** Оценка аномальности ТП возможна сравнением наблюдаемых и расчетных значений параметра, отвечающих теплогенерации пород коры и нормальному тепловому потоку из мантии [1]. Для вычислений использована связь теплогенерации и скорости продольных волн, распределение которой получено вдоль профилей ГСЗ XXIII ГТ VI. При расчете учитывался вероятный прогрев коры в процессе современной активизации [2]. Предполагалось, что бассейн охвачен им на всю ширину. В этом случае поправки, понижающие теплогенерацию и повышающие аномалию, окажутся максимальными. Результаты приведены на рис. 3.

Выявленные положительные аномалии ТП малоинтенсивны, т. е. даже визуально очевидная цепочка (см. выше) возмущений существенно не влияет на среднюю в полосе величину теплового потока. Флуктуации в первые милливольт на квадратный метр могут быть

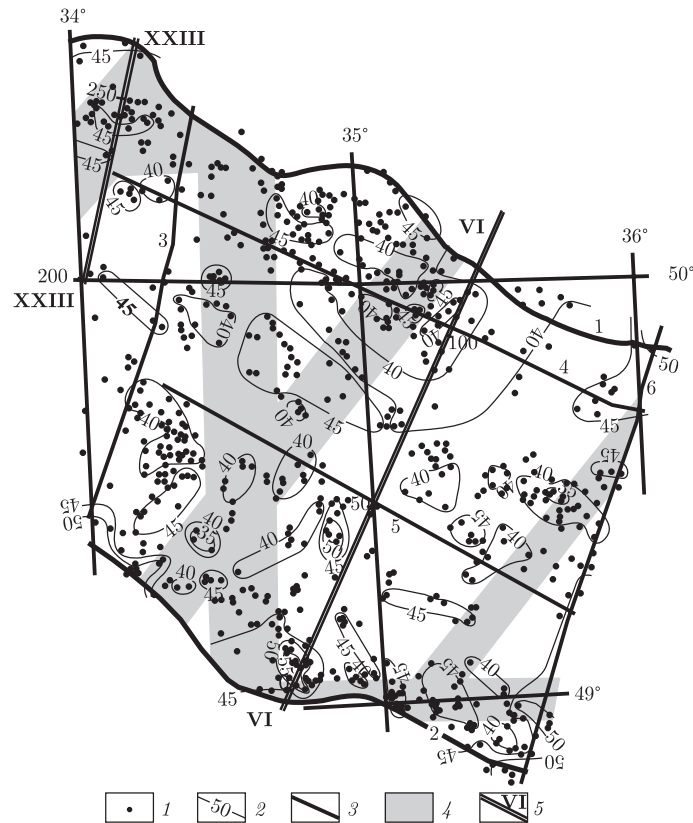


Рис. 2. Распределение теплового потока в юго-восточной части Днепровского бассейна: 1 — пункты определений ТП, 2 — изолинии ТП, мВт/м<sup>2</sup>; 3 — основные разломы (1, 2 — краевые ДДВ, 3 — Криворожско-Кременчугский, 4, 5 — краевые рифейского грабена ДДВ, 6 — Орехово-Павлоградский), 4 — зоны разломов, активизированных в последние 3 млн лет [4] (из-за своей очень большой ширины не показаны зоны активизации у краевых разломов ДДВ); 5 — профили ГСЗ

и случайными. С другой стороны, локальные аномалии довольно широко распространены в регионе (см. рис. 3). Вместе с проявлениями аномально высоких пластовых давлений (АВПД) они определенно указывают на наличие на глубине напорных горячих флюидов. Остается предположить, что процесс начался недавно (порядка 100 тыс. лет назад) и объемы пород вокруг проницаемых зон, подводящих снизу на глубину в несколько километров горячие растворы с углеводородами, еще не прогрелись.

Наличие современной активизации (и, более того, ее мантийного этажа) подтверждают и данные по изотопии гелия. Расчет показывает, что фоновое значение  $R$  во впадине должно составлять около  $2 \pm 2$ . Однако данных слишком мало, можно предположить, что процесс наиболее активен вблизи юго-западного краевого разлома ДДВ и северо-восточного краевого разлома рифейского грабена (см. рис. 3).

Сами по себе месторождения углеводородов также указывают на активизацию. Плотность ( $F$ ) запасов определялась как сумма всех запасов месторождений [3] в пределах полосы шириной 12,5 км, пересчитанных в тонны условного топлива (т у. т.), деленная на площадь полосы. Максимум приурочен к рифейскому грабену ДДВ.

Мантийная гравитационная аномалия в регионе (средняя для расчетных профилей [2]) достигает достоверного уровня, указывает на современную активизацию. Максимумы ано-

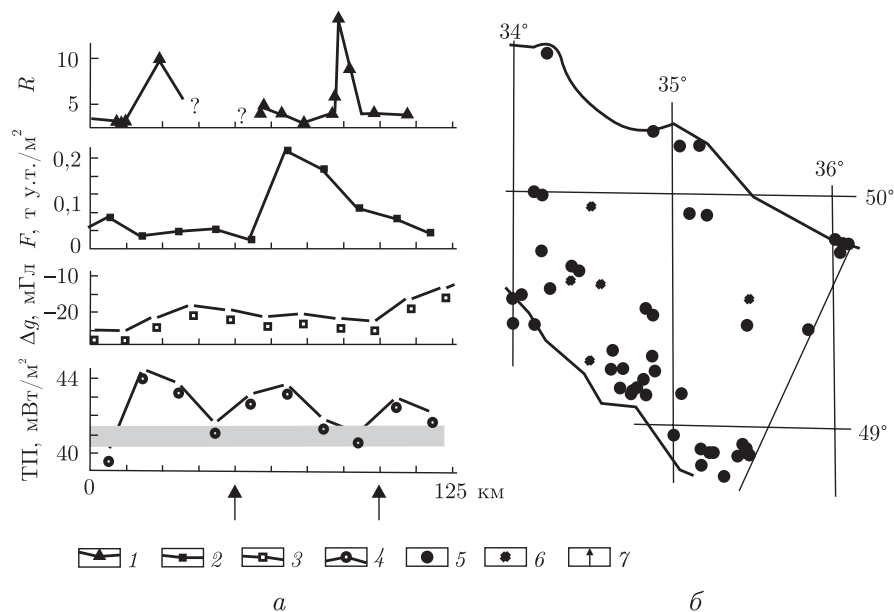


Рис. 3. Признаки современной активизации юго-восточной части Днепровского бассейна ДДВ:  
*а:* распределение изотопии гелия —  $R$  ( $R = {}^3\text{He}/{}^4\text{He} \cdot 10^8$ ) (1), плотности запасов месторождений углеводородов —  $F$  (2), мантийной гравитационной аномалии (3), средних величин ТП в пределах полос вдоль впадины шириной 12,5 км (4);  
*б:* распределение пунктов с ТП 50 мВт/м<sup>2</sup> и выше (5) и с АВПД (6);  
 расположение зон краевых разломов рифейского грабена ДДВ (7)

малии малоинтенсивны, они расположены вблизи юго-западного краевого разлома ДДВ и северо-западного краевого разлома рифейского грабена.

Скоростные разрезы вдоль профилей ГСЗ XXIII и ГТ VI позволяют наметить аномалии, которые могут быть связаны с перегревом средней и нижней коры. Они обнаруживаются в окраинной северо-восточной части впадины [1]. Вблизи юго-западного разлома ДДВ на скоростном разрезе вдоль профиля ГСЗ XXIII обнаружена пониженная скорость продольных волн под разделом М (7,8 км/с). Другие отличия разрезов от типичных для Украинского щита нельзя определенно увязать с современной активизацией региона.

Таким образом, новые исследования глубинного теплового потока части Днепровского бассейна ДДВ дали возможность уточнить характеристики теплового поля региона, выделить несколько локальных аномалий и цепочку небольших по площади положительных возмущений ТП, возможно, образующих одну аномалию, вытянутую вдоль юго-западного края впадины. Анализ этих данных и сопутствующей информации позволяет считать повышенные ТП следствием современной активизации.

1. Гордиенко В. В., Гордиенко И. В., Завгородняя О. В., Усенко О. В. Тепловое поле территории Украины. — Київ: Знання України, 2002. — 170 с.
2. Гордиенко В. В., Гордиенко И. В., Завгородняя О. В., Ковачикова С., Логвинов И. М., Пек И., Тарасов В. Н., Усенко О. В. и др. Днепровско-Донецкая впадина (геофизика, глубинные процессы). — Киев: Корвін пресс, 2006. — 142 с.
3. Атлас родовищ нафти і газу України: В 6 т. / За ред. М. М. Іванюти та ін. — Львів, 1998–1999. — Т. 1–6.

4. *Верховцев В. Г.* Новітні вертикальні рухи земної кори території України, їх взаємовідношення з лінійними та кільцевими структурами // Енергетика Землі, її геолого-екологічні прояви, науково-практичне використання. – Київ: ВПЦ “Київський університет”, 2006. – С. 129–137.
5. *Водообмен* в гидрогеологических структурах Украины. Водообмен в естественных условиях – Київ: Наук. думка, 1989. – 286 с.

*Институт геофизики им. С. И. Субботина  
НАН Украины, Киев*

*Поступило в редакцию 26.06.2013*

**В. В. Гордієнко, І. В. Гордієнко, О. В. Завгородня**

### **Теплове поле південно-східної частини Дніпровського басейну Дніпровсько-Донецької западини**

*Проведено розрахунок глибинного теплового потоку за даними з 182 свердловин. Вони згруповані в 104 пунктах. Отримане ущільнення мережі ліквідує деякі “білі плями” у вивченості теплового потоку південно-східної частини ДДЗ. До південно-західного крайового розлому ДДЗ приурочений ланцюжок позитивних аномалій теплового потоку, що перевищують 50 мВт/м<sup>2</sup>. Поблизу центру регіону аномальні теплові потоки перевищують 70 мВт/м<sup>2</sup>. Негативні аномалії теплового потоку поширені в регіоні помітно ширше. Частина з них тягнє до активізованих розломних зон. Аналіз даних та супутньої інформації дозволяє вважати підвищені теплові потоки наслідком сучасної активізації.*

**V. V. Gordienko, I. V. Gordienko, O. V. Zavgorodnjaja**

### **Heat field of the south-eastern part of the Dnieper basin of Dnieper-Donets depression**

*The values of the deep heat flow were studied in 182 boreholes. They are grouped into 104 points. The resulting densification of the network eliminates some of the “white spots” in the study of the heat flow of the south-eastern part of the DDD. A chain of positive anomalies of the heat flow exceeding 50 mW/m<sup>2</sup> is assigned to the south-western boundary DDD fault. Near the center of the region, the highest heat flows exceed 70 mW/m<sup>2</sup>. The negative heat flow anomalies are common in the region considerably wider. Some of them tend to the activated fault zones. The analysis of data and related information allows us to consider the increased heat flows as a consequence of the modern activation.*



Академик НАН Украины В. А. Иванов, М. В. Шокуров, В. А. Дулов,  
Е. В. Чечина

## Прогноз погодных катастроф в Черноморском регионе

*Представлены средства оперативного прогноза катастрофических погодных явлений в Черноморском регионе с использованием мезомасштабных атмосферных моделей MM5 и WRF, а также волновой модели WAM. Показано, что наводнение в Краснодарском крае России 7 июля 2012 г. было предсказано за пять дней, а катастрофический шторм 11 ноября 2007 г. вблизи побережья Крыма — за три дня до трагических событий. Обсуждены качество системы регионального прогноза МГИ НАН Украины и ее преимущества перед системами глобального прогноза. Система оперативного регионального моделирования атмосферы в МГИ НАН Украины могла бы стать элементом возможной системы раннего оповещения о погодных катастрофах в Азово-Черноморском регионе.*

Наводнение 6–7 июля 2012 г. в Краснодарском крае Российской Федерации унесло более 170 жизней и причинило огромный материальный ущерб. Катастрофический шторм 11 ноября 2007 г. вблизи побережья Крыма привел к гибели и авариям множество судов, человеческим жертвам, экологическим бедствиям из-за сброса в море большого количества мазута. Важно отметить, что прогноз обеих катастроф появился в интернете соответственно за пять и трое суток до трагических событий [1]. Региональная система раннего оповещения о погодных катастрофах в причерноморском регионе позволила бы сделать вывод о надвигающихся бедствиях и, тем самым, смягчить их последствия. Создание такой системы возможно на основе регионального моделирования атмосферы.

Цель данного сообщения — представить средства оперативного регионального прогноза, уже имеющиеся в Морском гидрофизическом институте НАН Украины, как возможный элемент будущей системы раннего оповещения о погодных катастрофах в Азово-Черноморском регионе.

**Система краткосрочного метеорологического прогноза МГИ НАН Украины.** В ведущих мировых оперативных центрах прогноза погоды, таких как *NCEP/NCAR* и *ECMWF*, четыре раза в сутки выполняется глобальный оперативный прогноз погоды с пространственным разрешением 30–50 км. Для анализа состояния атмосферы используются все доступные данные: спутниковые и наземные измерения, вертикальные зондирования и др. [2, 3]. Глобальные атмосферные модели позволяют достоверно прогнозировать развитие и перемещение синоптических циклонов с заблаговременностью несколько суток, однако, в силу их грубого пространственного разрешения, недооценивают экстремальные значения скорости ветра и осадков [4]. Это обстоятельство имеет критическое значение для предсказания региональных погодных катастроф.

Чтобы улучшить прогноз экстремальных погодных явлений необходимо использовать региональные модели с пространственным разрешением вплоть до 1 км. Соответствующие мезомасштабные атмосферные модели *MM5* и *WRF* разработаны Национальным центром атмосферных исследований США как для научных исследований, так и для выполнения оперативных прогнозов и региональных ре-анализов [5]. Такая модель требует адаптации

к конкретному региону, которая заключается в выборе наиболее подходящих схем параметризации физических процессов, а также более детальном задании свойств подстилающей поверхности, в особенности орографии в данном регионе. Модель *MM5*, адаптированная к Черноморскому региону в МГИ НАН Украины, использовалась для исследования отдельных мезомасштабных атмосферных процессов и экстремальных явлений [6–9].

Начиная с 2007 г., МГИ НАН Украины на основе модели *MM5* выполняет для Черноморского региона оперативный прогноз погоды с пространственным разрешением 10 км и заблаговременностью трое суток. Размеры расчетной области составляют 39–49° с. ш., 25–45° в. д., так что она покрывает всю акваторию Черного моря и позволяет анализировать как синоптическую ситуацию, так и мезомасштабные особенности. В качестве боковых граничных условий используются результаты глобального прогноза *NCEP/NCAR GFS* [2]. С начала 2011 г. выполняется также прогноз для Крымского региона с разрешением 3 км, а с середины 2011 г. заблаговременность прогноза была увеличена до пяти суток. На сегодня в институте реализован краткосрочный метеорологический прогноз для Азово-Черноморского региона с параллельным использованием двух мезомасштабных атмосферных моделей — *MM5* и *WRF*. Дополнительно к атмосферному прогнозу выполняется прогноз ветрового волнения на всей акватории Черного моря с использованием модели *WAM* [10]. Результаты прогноза в графическом и цифровом форматах предоставляются в открытом доступе в сети интернет [1].

**Катастрофический шторм 11 ноября 2007 г.** Катастрофический шторм был связан с прохождением циклона, который, возникнув над Эгейским морем, двигался на северо-восток над западной частью Черного моря и Крымом [11]. Форма и траектория движения циклона в глобальном и региональном прогнозах оказались практически идентичными. Согласно результатам глобального прогноза [2], скорость ветра на уровне 10 м над Черным морем не должна была превышать 25 м/с, но, по результатам регионального прогноза, она достигала 32 м/с. Правильность регионального прогноза подтверждается данными спутникового скаттерометра *QuikSCAT* (на срок шторма скорость ветра превышала 30 м/с [12]) и стандартными измерениями на метеостанциях. В частности, в Генической максимальная измеренная скорость ветра составляла 35 м/с (11.11.2007 12 : 00 UTC).

На рис. 1 представлены два варианта прогноза ветровых волн с помощью модели *WAM* с разрешением 10 км. В первом — на вход модели подавался ветер глобального прогноза [2], во втором — оперативного прогноза МГИ НАН Украины. В районе Севастополя максимальная высота значительных волн достигала 5 м для глобальной модели и 7 м для мезомасштабной модели. В районе Керченского пролива, где затонуло много судов, максимальные высоты волн были 5 и 9 м соответственно.

Полученные при региональном прогнозе карты параметров ветровых волн позволяют подробно проследить эволюцию поля волн. Волны, достигнув Керченского пролива, разогнались из области, прилегающей к прол. Босфор, развиваясь под действием юго-западного ветра на протяжении примерно 800 км в течение суток. Как известно, высота волн примерно пропорциональна квадрату скорости ветра (см., например, [10]). Поэтому недооценка величины скорости ветра в глобальном прогнозе привела к гораздо более существенной недооценке высоты волн. В результате глобальный прогноз не содержал предсказания особо опасного шторма, в то время как региональный прогноз на основе моделей *MM5* и *WAM* явно указывал на приближающуюся катастрофу.

**Катастрофическое наводнение в Краснодарском крае 6–7 июля 2012 г.** Циклон, вызвавший экстремальные осадки в Краснодарском крае, сформировался восточнее Черно-

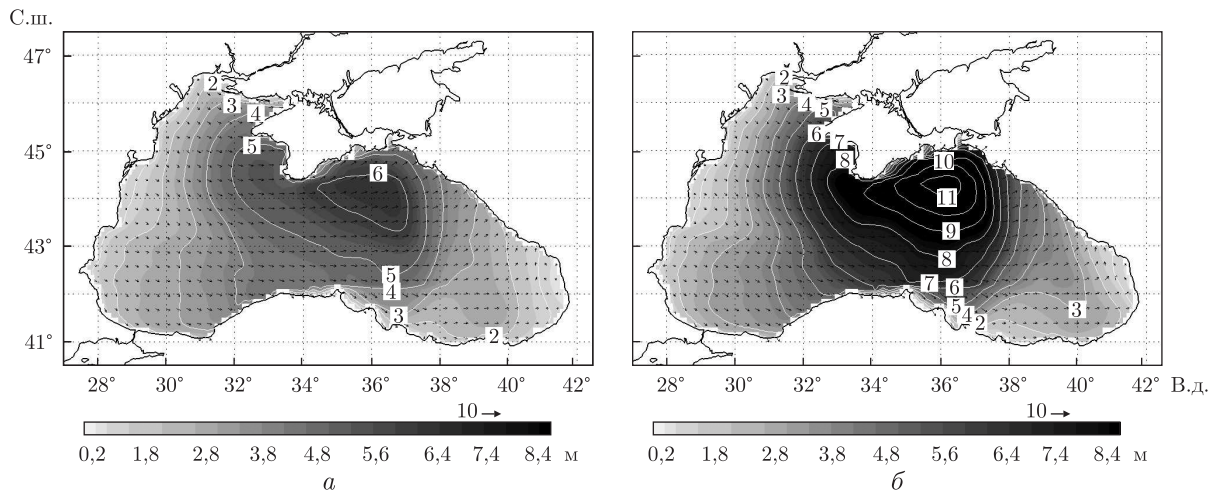


Рис. 1. Поле высоты значительных волн на момент катастрофического шторма. Расчеты выполнены на основе глобального (а) и регионального (б) прогнозов.  
 Цифры в квадрате — высота волн, м

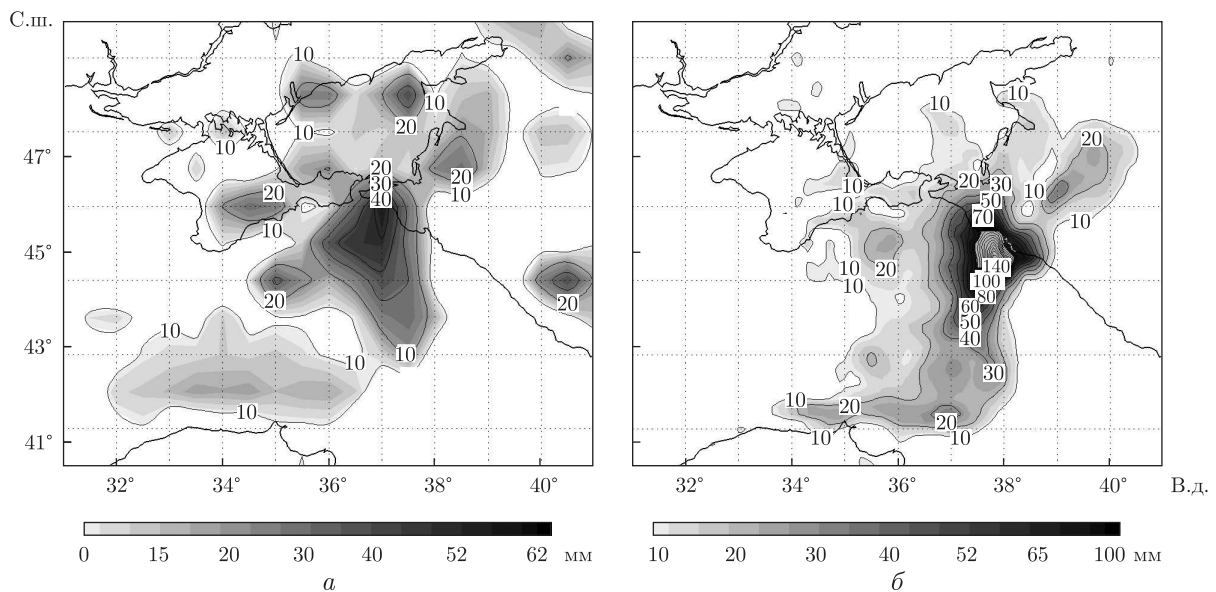


Рис. 2. Двухсуточная сумма осадков в районе катастрофы. Расчеты приведены согласно глобальному (а) и региональному (б) прогнозам.  
 Цифры в квадрате — сумма осадков, мм

го моря и медленно перемещался на юго-запад. В течение этих суток (6–7.07) центр циклона практически не сместился [13]. Крупномасштабные особенности этой синоптической картины были предсказаны как глобальными прогностическими моделями, так и в результате регионального прогноза. Глобальные модели дали незначительные величины осадков [2] (см. а на рис. 2), где максимальные двухсуточные суммы осадков в окрестности Новороссийска составляют около 60 мм. Согласно же прямым измерениям на метеостанциях в Геленджике и Новороссийске, количество осадков составляло соответственно 283 и 275 мм. В Крыму двухсуточная сумма осадков достигла 171 мм. Результаты мезомасштабного оперативно-

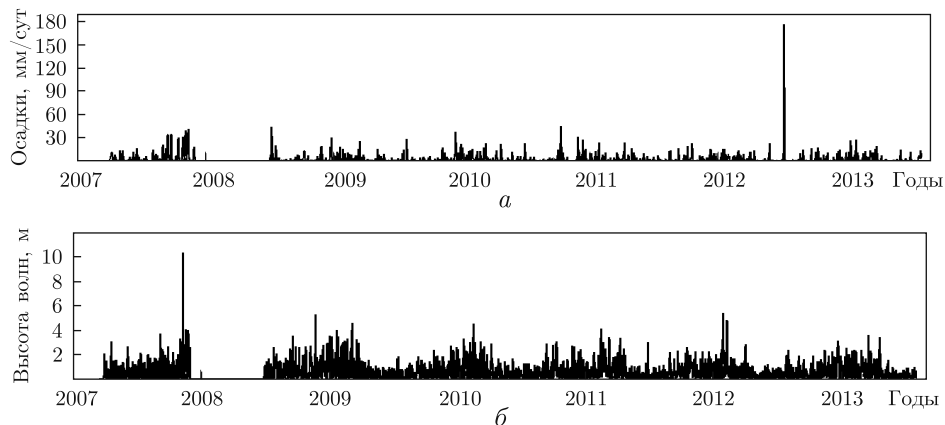


Рис. 3. Результаты оперативного прогноза МГИ НАН Украины за 2007–2013 гг. Суточные суммы осадков в районе Новороссийска (а) и высота значительных волн в районе Керченского пролива (б)

го прогноза по модели *MM5* с разрешением 10 км демонстрирует рис. 2, б. Именно такая карта осадков была представлена в свободном доступе в интернете за пять суток до катастрофы. Она дает сумму осадков за двое суток в окрестности Новороссийска, которая в три раза превышает предсказания глобальных моделей и согласуется с измерениями на метеостанциях во время катастрофы.

Региональные модели в отличие от глобальных выполняют непосредственный расчет процессов кучевой конвекции [4]. Это позволяет не только уточнить прогноз, но и детально разобраться в физике явлений. Создаваемый циклоном поток воздуха имел в районе Новороссийска юго-западное направление. При натекании этого потока на Мархотский хребет возникал подъем воздуха с вертикальной скоростью, достигающей 14 см/с. Это приводило к инициированию глубокой кучевой конвекции и локальному выпадению обильных ливневых осадков. Поскольку циклон практически не перемещался в продолжение 6–7 июля, описанный механизм работал в течение нескольких часов, что и вызвало катастрофическое наводнение. Такое объяснение рассматриваемого явления расходится с выводами [13], основанными только на стандартном метеорологическом анализе, и также невозможно в рамках глобального моделирования, поскольку требует учета региональной орографии. В то же время предложенная трактовка ситуации хорошо согласуется со снимками облачности со спутника Метеосат [14], где выделяется яркая кучевая облачность над зоной катастрофы. Снимки показывают глубокую кучевую конвекцию, продолжающуюся в течение, по крайней мере, 18 ч — с 12:00 6 июля по 6:00 7 июля, когда в районе бедствия выпадали ливневые осадки.

Важно отметить, что прогноз дает весьма небольшую площадь локализации экстремально больших осадков (см. б на рис. 2), которая в действительности имела место [13]. Характерный размер области, где двухсуточная сумма осадков превысила 100 мм, составляет 50 км. Наиболее же сильным осадкам с двухсуточной суммой более 200 мм соответствует область размером около 20 км. Итак, региональный прогноз, правильно учитывая микрофизику атмосферных процессов, действительно дал предсказание катастрофических ливней в окрестности Новороссийска. В то же время в рамках глобального прогноза или традиционного метеорологического анализа такое предсказание было невозможным.

**Обсуждение результатов.** Качество краткосрочного прогноза за все время работы системы в МГИ НАН Украины демонстрирует рис. 3, где показаны результаты прогноза

интенсивности осадков в районе Новороссийска с 2007 г. по настоящее время (система временно не работала в период с декабря 2007 г. по июль 2008 г.) (см. а) и показаны результаты прогноза высоты значительных волн в районе Керченского пролива (см. б). Графики не оставляют сомнений, что прогнозы аномально сильных ливней на 7 июля 1212 г. и катастрофического шторма на 11 ноября 2007 г. могли бы быть легко идентифицированы.

В настоящей работе на примере двух катастрофических погодных явлений в причерноморском регионе продемонстрированы качество и надежность мезомасштабных атмосферных прогнозов, а также их преимущества по отношению к глобальному прогнозу. Представленные средства оперативного регионального моделирования атмосферы в МГИ НАН Украины могли бы стать элементом возможной системы раннего оповещения о погодных катастрофах в Азово-Черноморском регионе.

*Работа выполнена в рамках проекта COCONET (Contract No. 287844) седьмой рамочной программы Европейского Сообщества при частичной поддержке Государственного фонда фундаментальных исследований Украины (контракт Ф53/117-2013).*

1. 5-Day weather forecast over the Black Sea. – Мор. гидрофиз. ин-т НАН Украины, 2007–2013. – <http://vao.hydrophys.org>.
2. Global Forecast System, National Weather Service, NOAA, USA. – Environment. Model. Center, 2013. – <http://www.emc.ncep.noaa.gov/index.php?branch=GFS>.
3. European Centre for Medium-Range Weather Forecasts. – Intergovernmental organisation, London, UK, 2008–2013. – <http://www.ecmwf.int/about/overview/>.
4. Clark A. J., Weiss S. J., John S. et al. An Overview of the 2010. – Hazardous Weather Testbed Experimental Forecast Program Spring Experiment // Bull. Am. Meteor. Soc. – 2012. – **93**. – P. 55–74.
5. Skamarock W. C., Klemp J. B., Dudhia J. et al. A description of the Advanced Research WRF version 3 // NCAR Tech. Note NCAR/TN – 475+STR, 2008. – Mesoscale and Microscale Meteorology Division. – National Center of Atmospheric Research, 2008. – 113 p.
6. Ефимов В. В., Станичний С. В., Шокуров М. В., Яровая Д. А. Наблюдение квазитропического циклона над Черным морем // Метеорология и гидрология. – 2008. – № 4. – С. 53–62.
7. Ефимов В. В., Барабанов В. С. Бризовая циркуляция в Черноморском регионе // Мор. гидрофиз. журн. – 2009. – № 5. – С. 23–36.
8. Иванов В. А., Овчаренко И. А., Прусов А. В., Шокуров М. В. Моделирование катастрофических паводков в регионе Южного берега Крыма // Доп. НАН України. – 2012. – № 8. – С. 79–84.
9. Ivanov V. A., Dulov V. A., Kuznetsov S. Yu. et al. Risk assessment of encountering killer waves in the Black Sea // Geography, Environment, Sustainability. – 2012. – **5**, No 1. – P. 84–111.
10. Holthuijsen L. H. Waves in Oceanic and Coastal Waters. – Cambridge, UK: Cambridge Univ. Press, 2007. – 387 p.
11. Овсиенко С. Н., Фащук Д. Я., Зацена С. Н. и др. Шторм 11 ноября 2007 г. в Керченском проливе: Хроника событий, математическое моделирование и географо-экологический анализ нефтяного разлива // Тр. гос. океанограф. ин-та. – 2008. – **211**. – С. 307–339.
12. Center for Satellite Applications and Research, NOAA Satellite and Information Service (NESDIS), NOAA, USA // Ocean Surface Winds Team. – 2013. – <http://manati.star.nesdis.noaa.gov>.
13. Куклев С. Б., Москаленко Л. В., Мельников В. А. и др. Влияние атмосферных синоптических процессов и ветра (динамические факторы) на термические условия и осадки в районе Северо-Кавказского побережья Черного моря по многолетним данным (1955–2012 гг.) // Соврем. пробл. дистанц. зондирования Земли из космоса. – 2013. – **10**, № 1. – С. 81–92.
14. Dundee Satellite Receiving Station. – Dundee University, 2013. – <http://www.sat.dundee.ac.uk>.

Морской гидрофизический институт  
НАН Украины, Севастополь

Поступило в редакцию 27.08.2013

Академік НАН України **В. О. Іванов, М. В. Шокуров, В. О. Дулов,  
К. В. Чечіна**

### **Прогноз погодних катастроф у Чорноморському регіоні**

*Представлено засоби оперативного прогнозу катастрофічних погодних явищ у Чорноморському регіоні з використанням мезомасштабних атмосферних моделей MM5 й WRF, а також хвильової моделі WAM. Показано, що повінь у Краснодарському краї Росії 7 липня 2012 р. було передбачено за п'ять днів, а катастрофічний шторм 11 листопада 2007 р. поблизу узбережжя Криму — за три дні до трагічних подій. Обговорено якість системи регіонального прогнозу МГІ НАН України та її переваги перед системами глобального прогнозу. Система оперативного регіонального моделювання атмосфери в МГІ НАН України може стати елементом можливої системи раннього сповіщення про погодні катастрофи в Азово-Чорноморському регіоні.*

Academician of the NAS of Ukraine **V. A. Ivanov, M. V. Shokurov, V. A. Dulov,  
E. V. Chechina**

### **Forecast of weather disasters in the Black Sea region**

*Means for the operational forecast of catastrophic weather events in the Black Sea region based on MM5 and WRF mesoscale atmospheric models and WAM wave model are presented. It is shown that the flooding in the Krasnodar Region, Russia, July 7, 2012 was predicted five days before the tragic events, and the catastrophic storm of November 11, 2007 off the coast of the Crimea was also predicted three days in advance. Quality of the regional forecast of MHI NASU and its advantages over the global forecast are discussed. The operational regional modeling of the atmosphere in MHI NASU could become an important element of a possible early warning system for weather disasters in the Azov-Black Sea region.*

А. С. Костинский

## О принципах сплайн-экстраполяции геофизических данных

(Представлено академиком НАН Украины В. И. Старостенко)

Возможные приложения сплайновой математики обсуждаются применительно к геофизическим наблюдениям, когда построить физическую динамическую модель либо невозможно, либо слишком сложно, нерационально. В подобных ситуациях простая идея сплайн-экстраполяции оказывается единственной: сетка узлов на заданном сегменте дополняется прогнозируемой точкой, строится “прогностический” сплайн на расширенной сетке, необходимо обеспечить минимум интеграла квадратичного отклонения, зависящего от ординаты добавочной точки как от параметра. Для равномерной сетки структурные единицы алгоритма экстраполяции представляются в виде последовательности разложений по координатам заданных точек, коэффициенты разложений доступны аналитически. Показано, что ордината прогнозируемой точки не зависит от шага сетки, это существенно для оценки ближайшего следующего в серии регулярных измерений, когда принципиальна не величина интервала между измерениями, а его неизменность.

Логика сплайн-экстраполяции, если речь идет о приближении известной, “физически разумной” функции, в основном сводится к следующему. Пусть на отрезке  $[a, b]$  в узлах сетки  $\Delta: a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$  заданы значения  $y_i = f(x_i)$ ,  $i = 0, \dots, N$ , а мы хотим оценить функцию  $f$  в некоторой точке  $x = x_c$  справа от  $[a, b]$ ,  $x_c > x_N$ . Обозначим через  $y_c^{(e)}$  искомого значение переменной ординаты  $y_c$ , то число, которое мы стремимся получить и которое, надо полагать, будет близко к  $f(x_c)$ . Построим, например, кубический интерполяционный сплайн  $S^{(N)}(f; x)$  на сетке  $\Delta$  [1]:

$$S^{(N)}(f; x) = y_i(1-t)^2(1+2t) + y_{i+1}t^2(3-2t) + m_i h_i t(1-t)^2 - m_{i+1} h_i t^2(1-t),$$

$$x \in [x_i, x_{i+1}], \quad t = \frac{(x-x_i)}{h_i}, \quad h_i = x_{i+1} - x_i, \quad i = 0, \dots, N-1, \quad (1)$$

$$S^{(N)}(f; x)|_{x=x_i} = y_i, \quad \frac{d}{dx} S^{(N)}(f; x)|_{x=x_i} = m_i, \quad i = 0, \dots, N, \quad (2)$$

$$S^{(N)}(f; x) \in C^2[a, b],$$

а затем, временно соглашаясь считать точку  $(x_c, y_c)$  известной, аналогичный сплайн  $S^{(N+1)}(f; x)$  на расширенной сетке  $\delta: a = x_0 < x_1 < \dots < x_N < x_{N+1} = x_c$ . Дополнительное условие в узле  $x = x_c$  —

$$S^{(N+1)}(f; x)|_{x=x_c} = y_c,$$

в силу нелокального характера сплайна приводит к тому, что  $S^{(N+1)}$  не совпадает с  $S^{(N)}$ , различие, если не касаться частных случаев, “затухает” по мере смещения влево: от точки  $x = x_b$

к точке  $x = x_a$ . “Расстояние” между  $S^{(N+1)}$  и  $S^{(N)}$  на  $[a, b]$  измеряется, строго говоря, тремя интегралами квадратичных отклонений

$$J_e^{(k)} = \int_a^b \left| \frac{d^k}{dx^k} S^{(N+1)}(f; x) - \frac{d^k}{dx^k} S^{(N)}(f; x) \right|^2 dx, \quad k = 0, 1, 2,$$

зависящими от  $y_c$  как от параметра, для определенности договоримся рассматривать пока только  $J_e^{(0)} \equiv I_e$ .

Не будем пока касаться вопроса о краевых условиях, принимая их во внимание, мы, быть может, только добавим варьируемые параметры или усложним пробную функцию  $I_e$ . Существенно, что при любом выборе краевых условий для равномерных сеток последовательность интерполяционных кубических сплайнов всегда сходится к интерполируемой непрерывной функции. В общем случае произвольного разбиения существуют возможности интерполяции с регулируемой точностью [1], и можно утверждать поэтому, что сплайн  $S^{(N)}$  на достаточно подробной сетке в некотором смысле близок функции  $f(x)$ . Свойства  $f$  на  $[a, b]$  заимствуются “реперной” интерполирующей функцией  $S^{(N)}$  и воспроизводятся (но с дополнительным искажением) интерполирующей функцией  $S^{(N+1)}$ . Качество интерполяции посредством  $S^{(N+1)}$  на  $[a, b]$  почти наверное хуже из-за, возможно, слишком крупного шага  $h_N = x_c - x_N$  и неопределенной ординаты  $y_c$ . Минимум  $I_e$  по  $y_c$ , таким образом, устанавливает естественный нижний предел сходимости  $S^{(N+1)}$  с аппроксимацией  $S^{(N)}$ , и это обстоятельство уже само по себе достаточное основание для того, чтобы определить точку минимума как “пробное” экстраполирующее значение  $y_c^{(e)}$  и исследовать разность  $f(x_c) - y_c^{(e)}$  в различных вариантах конструкций  $S^{(N)}$  и  $S^{(N+1)}$ .

Общий замысел решения задачи экстраполяции в смысле поиска минимума интеграла  $I_e$  заключается в разложении сплайна  $S^{(N+1)}$  по системе фундаментальных сплайнов на сетке  $\delta$  (возможно, конечно, использование  $B$ -сплайнов с конечным носителем [1]). Это позволяет записать в явном виде простую систему линейных уравнений относительно параметров и ее аналитическое решение, избежав вычисления собственных значений матриц численными методами в ситуации, когда достоверно не подтверждена невырожденность. Соответственно краевые условия для  $S^{(N+1)}$  диктуют характер разложения по базису и прогнозируемые параметры в точке  $x = x_c$ .

Простейший вариант — прогноз только по ординате — возникает, если потребовать непрерывности третьей производной  $S^{(N+1)}$  в узлах  $x_1, x_N$  [1]. Мы имеем одну варьируемую переменную  $\zeta = y_c$ , сплайн  $S^{(N+1)}$  в этом случае представляется в виде линейной комбинации

$$S^{(N+1)} = \sum_{i=0}^N y_i F_i(x) + y_c F_{N+1}(x), \quad (3)$$

где  $F_i(x)$ ,  $i = 0, \dots, N, N+1$ , — фундаментальные сплайны на сетке  $\delta$ , удовлетворяющие условию нормализации

$$\sum_{i=0}^{N+1} F_i(x) = 1, \quad x \in [a, x_c],$$



условиям интерполяции вида

$$F_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad i = 0, \dots, N, N+1, \quad j = 0, \dots, N, N+1,$$

и условиям непрерывности третьей производной в узлах  $x_1, x_N$ .

Пусть два произвольных сплайна  $S^{(A)}, S^{(B)}$ , записанных в виде (1), с коэффициентами  $m_i^{(A)}, m_i^{(B)}, i = 0, \dots, N$ , интерполируют нулевые значения на сетке  $\Delta$ . Интеграл по отрезку  $[a, b]$  от произведения  $S^{(A)}S^{(B)}$  выражается суммой

$$\frac{1}{105} \sum_{i=0}^{N-1} h_i^3 \{m_i^{(A)} m_i^{(B)} + m_{i+1}^{(A)} m_{i+1}^{(B)} - \frac{3}{4}(m_i^{(A)} m_{i+1}^{(B)} + m_{i+1}^{(A)} m_i^{(B)})\},$$

это — “вычислительный шлюз”, ведущий к аналитическому представлению минимума. Интегралы такого рода появляются, если подставить разложение (3) в выражение для  $I_e$ ,

$$I_e = \alpha_{00} + 2\alpha_{01}\zeta + \alpha_{11}\zeta^2,$$

коэффициент  $\alpha_{ij}, 0 \leq i, j \leq 1$ , есть интеграл по отрезку  $[a, b]$  от произведения вспомогательных сплайнов, их два, с ними можно связать числа 0,1:

$$\sum_{i=0}^N y_i F_i(x) - S^{(N)}(x) \rightarrow 0, \quad F_{N+1}(x) \rightarrow 1.$$

Обсудим краевые условия для сплайна с номером 0. В первую очередь следует договориться о выборе краевых условий для сплайна  $S^{(N)}$ , это вопрос существенный, если преследуется цель аналитически оценить зависимость прогнозируемой ординаты от характерного масштаба задачи, доминирующего шага “основной” сетки  $\Delta$ . Пусть предпочтение отдано естественным, наиболее простым по смыслу условиям

$$\left. \frac{d}{dx} S^{(N)}(f; x) \right|_{x=a} = z'_a, \quad \left. \frac{d}{dx} S^{(N)}(f; x) \right|_{x=b} = z'_b,$$

где числовые значения  $z'_a, z'_b$  получаются, например, конечно-разностной аппроксимацией или как результат дополнительного “сглаживания”:  $S^{(N)}$  должен в некотором смысле “наименее отличаться” от полинома второй или третьей степени [2].

Задача построения сплайна  $S^{(N)}$  разрешима для любых вещественных  $z'_a, z'_b$ , будем пока считать  $z'_a, z'_b$  известными параметрами. Затем, без ограничения общности, можно выбрать сетку  $\Delta$  равномерной с шагом  $h$  и записать  $x_c - x_N = hh_c$ , безразмерный множитель  $h_c$  исчисляется в долях  $h$ . Для примера, регулярные измерения химического состава, уровня и температуры грунтовых вод, концентрации радона в скважинах, в сущности, не предполагают точного знания времени измерения. Не подвергается сомнению только то, что промежутки времени между последовательными измерениями одинаковы.

Обозначим через  $D_k, k = 0, \dots, N$ , разрывы третьей производной сплайна  $S^{(N)}$  в узлах равномерной сетки  $\Delta$  [1]. Потребуем, чтобы сплайн  $S^{(N)}$  доставлял минимум по переменным  $z'_a, z'_b$  сумме

$$\sum_{k=0}^N D_k^2, \tag{4}$$

иначе говоря,  $S^{(N)}$  в смысле гладкости выбирается как наименее отличающийся от полинома третьей степени. Представим  $S^{(N)}$  в виде [2]:

$$S^{(N)} = \sum_{i=0}^N y_i F_i(x) + z'_a F_a(x) + z'_b F_b(x), \quad (5)$$

где  $F_i(x)$ ,  $i = 0, \dots, N$ , — фундаментальные сплайны на сетке  $\Delta$ , удовлетворяющие условиям интерполяции вида

$$F_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad i = 0, \dots, N, \quad j = 0, \dots, N,$$

и краевым условиям

$$F'_i(a) = F'_i(b) = 0,$$

появляются дополнительные базисные функции, подчиненные условиям

$$F_a(x_i) = F_b(x_i) = 0, \quad i = 0, \dots, N, \quad F'_a(a) = F'_b(b) = 1, \quad F'_a(b) = F'_b(a) = 0.$$

Из уравнения (5) следует выражение через разрывы базисных сплайнов

$$D_k(S^{(N)}) = \sum_{i=0}^N y_i D_k(F_i) + z'_a D_k(F_a) + z'_b D_k(F_b), \quad k = 0, \dots, N, \quad (6)$$

подставляя его в (4), имеем квадратичную форму по  $z'_a, z'_b$ . Условие минимума формы дает систему линейных уравнений, из которой, в свою очередь, получаем “оптимальные” краевые значения первых производных как линейные функции ординат  $y_i$ . Вычисляем коэффициенты линейного разложения

$$z'_a = \sum_{i=0}^N p_i y_i, \quad z'_b = \sum_{i=0}^N q_i y_i, \quad (7)$$

$$p_i = \frac{1}{\Omega} \sum_{k=0}^N D_k(F_i) [\omega_{12} D_k(F_b) - \omega_{22} D_k(F_a)],$$

$$q_i = \frac{1}{\Omega} \sum_{k=0}^N D_k(F_i) [\omega_{12} D_k(F_a) - \omega_{11} D_k(F_b)], \quad i = 0, \dots, N,$$

упрощает ситуацию свойство  $q_i = -p_{N-i}$ . Элементы матрицы системы, обозначенные как  $\omega_{ij}$ , зависят только от разрывов базисных функций  $F_a(x), F_b(x)$ ,

$$\omega_{11} = \sum_{k=0}^N D_k(F_a)^2, \quad \omega_{22} = \sum_{k=0}^N D_k(F_b)^2, \quad \omega_{12} = \omega_{21} = \sum_{k=0}^N D_k(F_a) D_k(F_b),$$

все это достаточно громоздкие выражения. Как промежуточный итог выделим зависимость от шага сетки

$$\omega_{11}, \omega_{22}, \omega_{12} \sim \frac{1}{h^4}, \quad \Omega = \text{Det}(\omega_{ij}) = \omega_{11}\omega_{22} - \omega_{12}^2 \sim \frac{1}{h^8}, \quad p_i, q_i \sim \frac{1}{h}.$$

Из выражений (5) и (7) следует линейное разложение коэффициента:

$$m_1^{(S(N))} = \sum_{i=0}^N y_i \{m_1(F_i) + p_i m_1(F_a) + q_i m_1(F_b)\}$$

и аналогично для коэффициента

$$m_{N-1}^{(S(N))} = \sum_{i=0}^N y_i \{m_{N-1}(F_i) + p_i m_{N-1}(F_a) + q_i m_{N-1}(F_b)\},$$

что, в свою очередь, дает возможность линейного разложения по ординатам параметров  $Z'_a, Z'_b$  в соотношениях

$$m_0^{(0)} + 2m_1^{(0)} + Z'_a = 0,$$

$$h_c m_{N-1}^{(0)} + (1 + h_c)(m_N^{(0)} + Z'_b) = 0,$$

$$Z'_a \equiv z'_a + 2m_1^{(S(N))} - \frac{1}{h} (2y_1 - \frac{5}{2}y_0 + \frac{1}{2}y_2),$$

$$Z'_b \equiv \frac{h_c}{1 + h_c} m_{N-1}^{(S(N))} + z'_b + \frac{1}{hh_c(1 + h_c)^2} y_N - \frac{h_c(3 + 2h_c)}{h(1 + h_c)^2} (y_N - y_{N-1}),$$

закрывающих систему уравнений для первых производных сплайна с номером 0. Коэффициент  $\alpha_{01}$  в разложении по  $\zeta$  интегрального отклонения  $I_e$  есть линейная комбинация  $Z'_a, Z'_b$ , коэффициент  $\alpha_{11}$  не зависит от ординат, в итоге искомая координата  $\zeta^{(\min)}$  точки минимума не зависит от шага сетки  $h$ .

Даже простые функциональные зависимости иллюстрируют и “тестируют” логику экстраполяции с помощью кубических сплайнов, уже здесь обнаруживается разнообразие ситуаций, вполне сопоставимых с “многоцветностью” реальности эксперимента. Первое, в чем следует удостовериться, очевидно, это “первичный” аргумент в пользу качества алгоритма экстраполяции: если для известной зависимости  $y = f(x)$  “псевдоэкспериментальные” значения  $y_i = f(x_i), i = 0, \dots, N$ , заданы на фиксированном отрезке и число  $N$  увеличивается, прогнозируемые ординаты  $y_i$  должны приближаться к  $f(x_c)$  для всех не слишком больших значений  $h_i$ . По крайней мере для равномерной сетки это действительно так, и кривые, построенные по отклонению функции, по отклонению производной, по комбинированному отклонению

$$\frac{I_e}{\min_{\zeta}(I_e)} + \frac{J_e^{(1)}}{\min_{\zeta}(J_e^{(1)})},$$

практически неразличимы (рис. 1). Минимальные по  $\zeta = y_c$  значения отклонений  $J_e^{(k)}, k = 0, 1, 2$ , строго говоря, должны быть функциями  $h_c$ , но оказывается, что они не зависят от  $h_c$  (рис. 2).

На фиксированном отрезке  $[0, 2\pi]$ , согласно рис. 1, в узлах равномерной сетки

$$x_i = hi, \quad i = 0, \dots, N, \quad h = \frac{2\pi}{N},$$

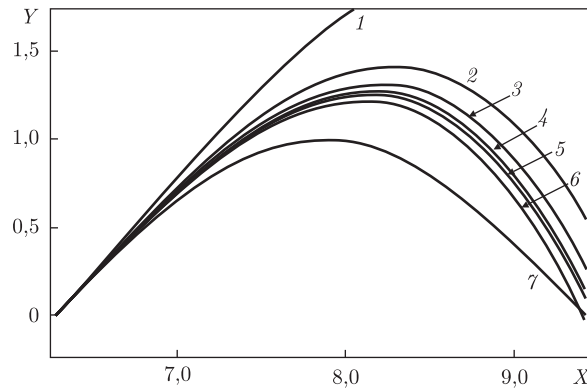


Рис. 1

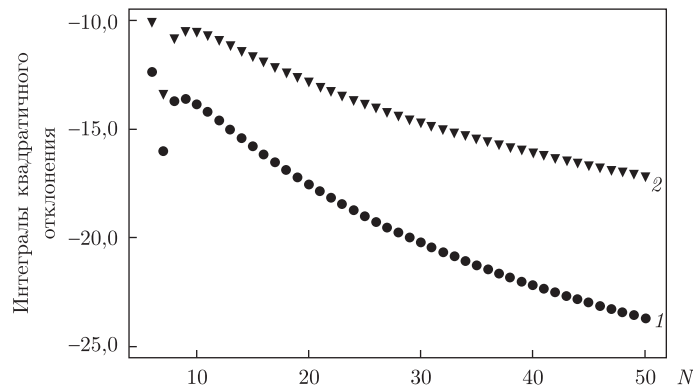


Рис. 2

заданы значения ординат  $y_i = \sin(x_i)$ . Прогнозируется значение  $y_c$  в точке

$$x_c = 2\pi + hh_c$$

для  $N = 10$  (кривая 1),  $N = 20$  (2),  $N = 30$  (3),  $N = 40$  (4),  $N = 50$  (5),  $N = 100$  (6) при меняющемся  $h_c$ ,  $h_c^{\min} \leq h_c \leq h_c^{\max}$ ,  $h_c^{\min} = 0,01$ ,  $h_c^{\max} = \pi/h$ . Графики зависимости  $y_c = y_c(x_c)$  с ростом  $N$  все точнее следуют за изгибом синуса (кривая 7).

Рис. 2 показывает, что с ростом  $N$  и уменьшением шага  $h$  на фиксированном отрезке изменения минимальные значения интегральных отклонений, как и ожидается, резко падают. Кривая 1 соответствует  $\log \min(J_e^{(0)})$ , кривая 2 —  $\log \min(J_e^{(1)})$ .

Геофизическая картина Земли — это “островки” нестохастических связей между явлениями, они могут появляться и исчезать и не сливаются в “материк”. Как иллюстрация, измерения крипа в точке разлома рядом с очаговой областью не показывали никаких закономерных изменений перед землетрясением с магнитудой 5,9 в центральной Калифорнии 6 августа 1979 г., но в коровых движениях перед землетрясением Тонанкай 7 декабря 1944 г. составляющая-предвестник несомненна [3]. Только физики или химии процессов здесь недостаточно для полноты динамического описания, приемлемо сузить набор динамических переменных не удастся главным образом из-за сложности геологической “сцены”, на которой происходят события. Решающую роль приобретает, следовательно, формулировка общих “первичных” принципов, позволяющих ограничить множество вариантов выбора модели, принципов, относящихся к совокупности, “россыпи” на плоскости экспериментальных то-

чек. Это в первую очередь в определенном смысле понимаемая оптимальность, отражение всеобщности “бритвы Оккама” [4, с. 5]. Изложенную выше математическую схему следует рассматривать именно с такой точки зрения.

1. Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. Л. Методы сплайн-функций. – Москва: Наука, 1980. – 352 с.
2. Вершинин В. В., Завьялов Ю. С., Павлов Н. Н. Экстремальные свойства сплайнов и задача сглаживания. – Новосибирск: Наука, 1988. – 102 с.
3. Моги К. Предсказание землетрясений. – Москва: Мир, 1988. – 382 с.
4. Романовский Ю. М., Степанова Н. В., Чернавский Д. С. Математическая биофизика. – Москва: Наука, 1984. – 234 с.

Отдел сейсмологии Института геофизики  
им. С. И. Субботина НАН Украины, Симферополь

Поступило в редакцию 09.09.13

**О. С. Костінський**

### **Про принципи сплайн-екстраполяції геофізичних даних**

*Можливі застосування сплайнової математики обговорюються стосовно до геофізичних спостережень, коли побудувати фізичну динамічну модель або неможливо, або занадто складно, нерационально. У подібних ситуаціях проста ідея сплайн-екстраполяції виявляється єдиною: сітка вузлів на заданому сегменті доповнюється прогнозованою точкою, будується “прогностичний” сплайн на розширеній сітці, необхідно забезпечити мінімум інтеграла квадратичного відхилення, залежного від ординати додаткової точки як від параметра. Для рівномірної сітки структурні одиниці алгоритму екстраполяції представляються у вигляді послідовності розкладів за координатами заданих точок, коефіцієнти розкладань доступні аналітично. Показано, що ордината прогнозованої точки не залежить від кроку сітки, це суттєво для оцінки найближчого наступного в серії регулярних вимірювань, коли принциповою є не величина інтервалу між вимірами, а його незмінність.*

**A. S. Kostinsky**

### **On the principles of a spline extrapolation concerning geophysical data**

*Possible applications of spline mathematics applied to geophysical observations, when to build a physical dynamic model is either impossible or too complicated and unpractical, are discussed. In situations like this, the simple idea of spline extrapolation is determined uniquely: the net of knots on a specified segment is supplemented by a potentially predictable point, a “prognostic” spline on the augmented net is built, and it is necessary to ensure a minimum of the integral of the quadratic deviation depending on the add-on point ordinate as a parameter. For a uniform net base, structural units of the extrapolation algorithm are represented in the form of a sequence of expansions in terms of coordinates of the specified points, and the expansion coefficients are available analytically. It is found that the forecasted point ordinate does not depend on the net spacing, which is essential for the evaluation of the nearest next event in a series of regular measurements, when the basic thing is not the interval between measurements, but its constancy.*

V. S. Mostovoy, S. V. Mostovyi

## Estimation of the parameters of seismic waves

*(Presented by Academician of the NAS of Ukraine V. I. Starostenko)*

*We consider a problem of estimation of the parameters of a seismic signal based on real observed data. For this purpose, we propose a new mathematical model that reduces the task to a nonlinear, nonsmooth, nonconvex minimization problem. Using a special structure of the signal, we also propose a numerical algorithm of finding the solution of the optimization problem. Our method is based on the combination of the Levenberg–Marquardt algorithm and a simulated annealing type approach. We show the convergence of the algorithm and discuss the practical implications, which lie in a good compatibility with real seismic data, and the applicability to experiments.*

**Introduction.** One of the central problems in the seismic signal processing is the determination of parameters of a signal such as the damping decrement, the principal eigenfrequency, the moment of arrival, etc. Usually, seismic signals such as compression plane waves, distortional waves, surface waves, Rayleigh waves, ground roll modes, and Love waves are modeled via physically realizable signals, see [2, 14, 15], that are characterized by the spectral band. It is natural to approximate such signals by a superposition of Berlage impulses, as a generalization of the model of simple oscillators. Such kind of modeling is widely used in seismology. With the goal to find an optimal approach to the estimation of the “key” seismic parameters, it might be reasonable to restrict oneself to a set of mathematical models of the seismic signals that are used in practice. One way of doing this is to use Berlage impulses that have enough degrees of freedom for the approximation of a wide class of seismic signal forms in comparison to other types of signals, see, e. g., [2]. In this case, the form of a signal is defined by a 5-dimensional vector of free parameters. In Section 2, we propose a novel approach that is based on an enlargement of the vector of free parameters to a 6-dimensional vector. This gives more flexibility and allows one to consider different models in one formulation. By choosing some of the free parameters to be zero or one, we can include almost every practically interesting case in our model and, in particular, to recover the original 5-dimensional models. Our approach leads to a minimization problem, a solution to which gives the optimal set of “key” parameters in the sense explained below. We also propose a numerical algorithm for solving this optimization problem, convergence properties of which are established and are discussed as well.

One of the merits of our method is in the balance between the ability to well approximate the desired set of parameters of the signals (from the practical side) and the analytical tractability (from the theoretical viewpoint). In practice, our model was successfully implemented in multiple experiments such as the oil and gas detection and the monitoring of natural and man-made objects, see [10, 11, 12] for details. From the theoretical point of view, first, it is proven in [12] that the solution to our central optimization problem (5) exists. Second, since the objective function in the minimization problem (5) is nonlinear, nonsmooth, nonconvex, and multidimensional, the delicate optimization techniques are required to construct an approximation to the solution to (5). Thus, we propose a numerical algorithm of solving (5), the efficiency of which is based

on *local* continuity, boundedness, and differentiability of the objective. Behind our numerical method are the well-known ideas of nonlinear optimization such as the simulated annealing and the Levenberg–Marquardt algorithm, see [7, 8, 13]. Our approach turns out to be convergent to a true solution (in probability with respect to a certain probability measure introduced in Section 4), as the running time increases. Convergence results were established in [12]. Finally, it should be mentioned that our method is well-suited for parallel computing, and the running time of numerical evaluations is of order of minutes on a standard lap top, which is convenient in experiments.

The remainder of the paper is organized as follows: in Section 2, we describe the model of signal, Section 3 contains the formulation of the central optimization problem (5), a numerical algorithm of solution to which is presented in Section 4. Conclusion is stated in Section 5.

**2. Mathematical model of seismic activity process.** Let us consider a general representation of the impulses used to model many seismic signals, which are often used in seismology. Free parameters of such impulses define different models. Let us define the function

$$S: \mathbb{R} \times [-A, A] \times \mathbb{R}_+ \times \mathbb{N} \cup \{0\} \times \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+ \times [\Omega_1, \Omega_2] \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$$

given by

$$S(t, a, \alpha, \beta, \omega, \tau, T) = aI_{\tau, \tau+T}(t) \exp\{-\alpha(t - \tau)\}(t - \tau)^\beta \sin(\omega(t - \tau)), \quad (1)$$

where the meaning of all the parameters is described below. From the physical point of view, all the parameters in (1) are physically substantial ones. The meaning of the symbols in the previous expression is the following:  $t$  stands for the time argument, the other variables are treated as the free parameters of the model. The parameter  $a$  denotes the amplitude of the signal. It is the only parameter that enters model (1) linearly, whereas all other parameters enter (1) nonlinearly. The first nonlinear parameter  $\alpha$  is the damping characteristic of oscillations. The next parameter  $\beta$  is used for a correction of the impulse front. This parameter gives us the possibility to regulate the steepness of the pulse edge. Parameter  $\tau$  is used for physically realizable impulses as the time characteristic of the signal appearance (the left endpoint of the indicator interval of the signal). Parameter  $\omega$  characterizes the angular frequency of the impulse oscillation. Parameter  $T$  characterizes the length of the interval, where the signal exists ( $\tau + T$  is the right endpoint of the indicator interval). We restrict the admissible set of amplitudes and frequencies to the intervals  $[-A, A]$  and  $[\Omega_1, \Omega_2]$ , respectively, where  $A$ ,  $\Omega_1$ , and  $\Omega_2$  are some positive constants. In (1),  $I_{\tau, \tau+T}(t)$  denotes the indicator function of the interval  $[\tau, \tau + T]$ , i. e.

$$I_{\tau, \tau+T}(t) = \begin{cases} 1, & \text{if } t \in [\tau, \tau + T], \\ 0, & \text{if } t \in (-\infty, \tau) \cup (\tau + T, +\infty). \end{cases}$$

By changing the parameters  $\tau$  and  $T$ , we have a possibility to restrict the signal to the interval between its appearance and disappearance. We will call such impulse (1) a *generalized Berlage impulse* with the linear parameter  $a$  and five nonlinear other parameters, as oppose to the Berlage impulse defined, e. g., in [2], which is a particular case of the generalized Berlage impulse when the parameters  $\beta = 0$  and  $T = \infty$ . We also need to introduce the vector  $\mathbf{P}$  of the free parameters of model (1). Its representation is given by

$$\mathbf{P} = \{P_k\}; \quad k = \overline{1, 6}; \quad \{P_1 = a, P_2 = \alpha, P_3 = \beta, P_4 = \tau, P_5 = \omega, P_6 = T\}. \quad (2)$$

In view of (2), we can rewrite (1) as follows:

$$S(t, \mathbf{P}) = P_1 I_{P_5, P_5+P_6}(t) \exp\{-P_2(t - P_5)\} (t - P_5)^{P_3} \sin(P_4(t - P_5)). \quad (3)$$

Fixing certain components of the vector  $\mathbf{P}$  of the seismic signal model, one can obtain a restriction of the model of seismic signal. Restricted signals will be determined by a smaller number of free parameters and will have more specific properties. In order to set up the optimization problem (5) and to construct a numerical algorithm of its solution, it is convenient to arrange such kind of vectors into a matrix. This matrix will determine the set of different models of seismic signals. The index of every model will be the same as the column number of this matrix. In such a case, we will get a possibility to model the recorded data via a *superposition* of signals, see (4) below.

Let us demonstrate how certain signals widely used in seismic practice can be obtained from our model (1) by changing the parameters of the model that are encapsulated in vector  $\mathbf{P}$ . For example, when  $P_3 = 1$ , we get a model of approximated Berlage impulse in the interval  $[P_5, P_5 + P_6]$ :

$$S(t, \mathbf{P}) = P_1 I_{P_5, P_5+P_6}(t) \exp\{-P_2(t - P_5)\} \sin(P_4(t - P_5)).$$

When  $P_6 = \infty$ , the indicator of the interval  $I_{P_5, P_5+P_6}(t)$  becomes the Heaviside step function  $\eta(t - \tau)$ , where

$$\eta(x) = \begin{cases} 1, & \text{if } x \geq 0, \\ 0, & \text{if } x < 0, \end{cases}$$

and we get a Berlage impulse with the linear parameter  $P_1$  denoting its amplitude. If  $P_3$  is equal zero and  $P_6 = \infty$ , expression (3) models a fading sinusoid

$$S(t, \mathbf{P}) = P_1 \eta(t - P_5) \exp\{-P_2(t - P_5)\} \sin(P_4(t - P_5)),$$

which can be represented in terms of widely used symbols in physics as follows:

$$S(t, a, \alpha, \omega, \tau) = a \eta(t - \tau) \exp\{-\alpha(t - \tau)\} \sin(\omega(t - \tau)).$$

If  $P_2 = P_3 = 0$  and  $t \in [P_5, P_5 + P_6]$ , the impulse will turn into the first Fourier harmonic on the interval  $[P_5, P_5 + P_6]$  with a period  $P_6$ :

$$S(t, \mathbf{P}) = P_1 I_{P_5, P_5+P_6}(t) \sin(P_4(t - P_5)).$$

The natural generalization, which allows us to consider more complicated signals, is based on a superposition of signals (3). In this case, we can define a (more general) signal  $\mathbb{S}(t, \mathbf{M})$  as

$$\mathbb{S}(t, \mathbf{M}) = \sum_{q=1}^Q S(t, \mathbf{P}_q), \quad (4)$$

where the matrix  $\mathbf{M}$  consists of the column vectors  $\mathbf{P}_q$ ,  $q = \overline{1, Q}$ , and contains all free parameters of our model. The signal  $S(t, \mathbf{P}_q)$  with a specified vector  $\mathbf{P}_q$  is called the  $q$ -th submodel. The set of the admissible values for  $\mathbf{M}$  is denoted by  $\mathcal{A}$ , which is uniquely defined by the domain of  $S$ . Finally, we are ready to state the model of signal that we used for applications and that



is considered in the following sections. For every seismic record  $y(t)$ ,  $t \in [0, \mathcal{T}]$ , where  $\mathcal{T}$  is the length of the seismic record, we suppose that  $y(t)$  is the sum of a seismic signal of the form (4) and an additive background noise  $n(t)$ ,

$$y(t) = \mathbb{S}(t, \mathbf{M}) + n(t), \quad t \in [0, \mathcal{T}].$$

**3. Optimization problem.** The mathematical problem consists of an estimation of the matrix of free parameters  $\mathbf{M}$  corresponding to a recorded seismogram  $y(t)$ ,  $t \in [0, \mathcal{T}]$ , and some statistical characteristics of the background noise  $n$ . In the simplest model of the noise  $n$ , one can consider an additional condition that the background noise is uncorrelated, i. e. its autocorrelation is the  $\delta$ -function. We assume that the *a priori* distribution of  $\mathbf{M}$  is a uniform distribution over  $\mathcal{A}$  and use the goodness-of-fit test for  $\mathbb{F}(\mathbf{M})$  to set up an optimization problem, a solution to which we will call the optimal value of  $\mathbf{M}$ , where  $\mathbb{F}$  is defined as

$$\mathbb{F}(\mathbf{M}) = \int_0^{\mathcal{T}} (y(t) - \mathbb{S}(t, \mathbf{M}))^2 dt, \quad \mathbf{M} \in \mathcal{A}.$$

This leads to the optimization problem

$$\inf_{\mathbf{M} \in \mathcal{A}} \mathbb{F}(\mathbf{M}), \tag{5}$$

where  $\mathcal{A}$  is the set of admissible values of  $\mathbf{M}$  defined above. When the objective is continuous, one can see that problem (5) is the Mayer problem in the calculus of variations, see [3, 5]. Therefore, variational methods are natural candidates for the analysis of (5).

Since the primal goal of this work is to construct a model and a mathematical approach for the *practical* purposes, it is natural to satisfy oneself with an *approximate* solution to (5) with a given tolerance  $\varepsilon > 0$ , i. e. by calculating a value  $\widehat{\mathbf{M}}$  such that

$$\mathbb{F}(\widehat{\mathbf{M}}) - \inf_{\mathbf{M} \in \mathcal{A}} \mathbb{F}(\mathbf{M}) \leq \varepsilon.$$

Such a value  $\widehat{\mathbf{M}}$  will be called a solution to (5).

One drawback of the variational approach is in the requirement of continuity (or even smoothness) of the objective  $\mathbb{F}$  that is often not available in practice. In particular, in our case, impulse (1) includes the discontinuous term  $I$  corresponding to the step function, see (3). Therefore one has to use the alternative techniques of nonlinear optimization to study (5). Additional challenges lie in the nonconvexity and the high nonlinearity of  $\mathbb{F}$ . Of course, one can approximate  $\mathbb{F}$  with a smooth function, e. g. via mollifiers, see [4], and to study the corresponding smooth problem using variational techniques. However, since mollification does not remedy nonlinearity, one still has to apply some delicate methods of nonlinear optimization, see, e. g., [1].

**Solution to the optimization problem (5).** The main difficulty in the construction of an effective numerical algorithm for finding a solution to (5) is the *discontinuity* of the objective  $\mathbb{F}$  explained above. Instead of mollifying the objective, we propose a different approach that is convergent (to the true solution of (5)) and analytically tractable in the sense explained below.

Even though our objective  $\mathbb{F}$  is not continuous everywhere in its domain, it is (infinitely many times) differentiable by Lebesgue almost everywhere in  $\mathcal{A}$ , except for some set of discontinuities of (Lebesgue) measure zero. Moreover,  $\mathbb{F}$  does not show a pathological behavior at discontinuities,

outside of which it stays locally smooth and uniformly bounded on compact sets. Therefore, we can use optimization techniques to find the **local** minima. Numerically, we use the Levenberg–Marquardt algorithm for this purpose, see [7, 8, 13]. Having the procedure of finding the local minima, we can hope to recover the global minimum by repeating the Levenberg–Marquardt procedure many times starting from different (randomly chosen) initial points. The reader can see the intimate relation to the *simulated annealing* and *Metropolis–Hastings* algorithms, see [6, 9]. In our settings, the problem is studied in [12], and the convergence in probability (for a given tolerance, with respect to a probability measure on  $\mathcal{A}$  that is used for the generation of starting points) is proven there. Moreover, we can even show the almost sure convergence if the set  $\mathcal{A}$  is assumed to be compact (this is a reasonable and non-restrictive assumption that often holds in practice, if we have some *a priori* information about the possible ranges of the components of  $\mathbf{M}$ ). Thus, if we run our algorithm for a sufficiently long time, the estimate very close to the true value of a minimizer to (5) will be found. The description of the applications of our method to various practical problems is contained in [12].

To guarantee the convergence of the algorithm in probability, *any* probability distribution over  $\mathcal{A}$ , such that the Lebesgue measure on  $\mathcal{A}$  is absolutely continuous in the probability measure, i. e. every subset of  $\mathcal{A}$  with a positive Lebesgue measure has positive probability, could be used for the generation of starting points. From the practical point of view, our algorithm is tailor made for parallel computing. It converges fast enough to be used on a usual computer, since the Levenberg–Marquardt procedure is extremely efficient for minimizing twice differentiable functions, which is almost our case, except for the fact that  $\mathbb{F}$  is differentiable (infinitely many times) locally, not globally.

**Conclusion.** We proposed a new model of seismic data and an algorithm of finding the optimal values of the seismic parameters of special interest, such as the damping decrement, the principal eigenfrequency, and the moment of arrival. Our model is a generalization of the classical seismic models in [2]. The determination of the optimal values of free parameters of the model is based on a criterion, which we aim to minimize. This leads to a nontrivial optimization problem (5), a solution to which can be obtained via a numerical algorithm we constructed as well. In turn, our numerical algorithm is studied both theoretically (here, the existence of a solution and the convergence of the algorithm are proven) and practically in the numerical experiments (see examples in [10]).

1. Bertsekas D. P. Nonlinear programming. – Belmont, MA: Athena Sci., 1999. – 201 p.
2. Berzon I. S., Epimat'eva A. M., Pariiskaya G. N., Starodubrovskaya S. P. Dynamical characteristics of seismic waves in real media. – Moscow: Izd. AN SSSR, 1962. – (in Russian).
3. Bliss G. A. Lectures on the calculus of variations. – Chicago: Univ. of Chicago, 1947. – 291 p.
4. Evans L. C. Partial differential equations. – Providence, RI: Amer. Math. Soc., 1997. – 664 p.
5. Fleming W. R., Rishel R. W. Deterministic and stochastic optimal control. – New York: Springer, 1975. – 222 p.
6. Kirkpatrick S., Gelatt C., Vecchi M. Optimization by simulated annealing // Science. – 1983. – **220**. – P. 671–680.
7. Levenberg K. A method for the solution of certain non-linear problems in least squares // Quart. Appl. Math. – 1944. – **2**. – P. 164–168.
8. Marquardt D. W. An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters // J. Soc. Indust. Appl. Math. – 1963. – **2**, No 2. – P. 431–441.
9. Metropolis N., Rosenbluth A., Teller A., Teller E. Equations of state calculations by fast computing machines // J. Chem. Phys. – 1953. – **21**, No 6. – P. 1087–1092.
10. Mostovyi S. V., Mostovoy V. S. A variational method to the solution of an inverse problem at the accumulation of seismic signals in the active monitoring // Dopov. NAN Ukr. – 2008. – No 8. – P. 113–116.

11. *Mostovyi S. V., Starostenko V. I.* Interpretation of geophysical data under uncertainty information // *Izv. AN SSSR. Fiz. Zem.* – 1987. – No 5. – P. 31–40.
12. *Mostovoy V. S.* Models of systems of monitoring of geophysical fields (Doctoral Dissertation, Phys.-Math. Sci.). – Kyiv: Kyiv Univ., 2013 (in Russian).
13. *Pujol J.* The solution of nonlinear inverse problems and the Levenberg–Marquardt method // *Geophys.* – 2007. – **72**, No 4. – P. W1–W16.
14. *Ricker N.* The form and laws of propagation of seismic wavelets // *Ibid.* – 1953. – **18**. – P. 10–40.
15. *Robinson E.* Predictive decomposition of time series with application to seismic exploration // *Ibid.* – 1967. – **32**, No 3. – P. 418–484.

*Institute of Geophysics of the NAS of Ukraine, Kiev  
National Aviation University, Kiev*

*Received 19.08.2013*

**В. С. Мостовий, С. В. Мостовий**

### **Оцінка параметрів сейсмічних хвиль**

*Розглядається задача оцінки параметрів сейсмічного сигналу, що базується на реальних спостережених даних. Для цього пропонується нова математична модель, яка зводить задачу до нелінійної негладкої задачі неопуклої мінімізації. Пропонується чисельний алгоритм знаходження розв'язку задачі оптимізації, що враховує специфіку структури сигналу. Метод заснований на комбінації алгоритму Левенберга–Марквардта і метода симуляції аннілінга. Показано збіжність алгоритму, його практичне застосування та хорошу сумісність моделі з сейсмічними експериментальними даними.*

**В. С. Мостовой, С. В. Мостовой**

### **Оценка параметров сейсмических волн**

*Рассматривается задача оценки параметров сейсмического сигнала, основанная на реальных наблюдаемых данных. Для этого предлагается новая математическая модель, которая сводит задачу к нелинейной, негладкой задаче невыпуклой минимизации. Предлагается численный алгоритм нахождения решения задачи оптимизации, учитывающий специфику структуры сигнала. Метод основан на комбинации алгоритма Левенберга–Марквардта и метода симуляции аннилинга. Показаны сходимость алгоритма, его практическое применение и хорошая совместимость модели с сейсмическими экспериментальными данными.*



УДК 546.185

**Н. Ю. Струтинська, І. В. Затовський,**  
член-кореспондент НАН України **М. С. Слободяник, А. І. Малишенко,**  
**Б. Г. Місчанчук, О. А. Беда**

### **Синтез та термічні перетворення складнозаміщених карбонатвмісних гідроксоапатитів**

*Синтезовано ряд складнозаміщених ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ )-вмісних гідроксоапатитів у розчинах системи  $\text{Na}^+ - \text{Ca}^{2+} - \text{NO}_3^- - \text{CO}_3^{2-} - \text{PO}_4^{3-}$  при різних концентраціях вихідних компонентів та досліджено особливості їх термічних перетворень при нагріванні до 700 °С. Інтерпретацію отриманих результатів проведено із залученням методів порошкової рентгенографії, ІЧ спектроскопії та температурно-програмованої десорбційної мас-спектрометрії.*

Синтетичні апатити та їх заміщені аналоги широко застосовуються як сорбенти [1, 2], каталізатори в реакціях окиснення [3–6], гідратації нітрילів [7] та як оптичні матеріали [8]. Також вони слугують основою біоматеріалів-імплантантів у стоматології та ортопедії [9, 10]. У цьому аспекті залишаються актуальними питання впливу термообробки (часу і температури) на характеристики та структурні перетворення у карбонатзаміщених гідроксоапатитах, які за складом є найбільш наближеними до біологічних об'єктів.

У даному повідомленні представлено результати дослідження особливостей формування та термічних перетворень для складнозаміщених гідроксоапатитів (ГАП) кальцію, отриманих за різних умов синтезу з водних розчинів системи  $\text{Na}^+ - \text{Ca}^{2+} - \text{NO}_3^- - \text{CO}_3^{2-} - \text{PO}_4^{3-}$  при фіксованому мольному співвідношенні Ca/P, що дорівнює 1,67, та  $\text{CO}_3^{2-}/\text{PO}_4^{3-} - 1,0; 2,0; 3,0$ .

Як вихідні компоненти були використані  $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  та  $\text{Na}_3\text{PO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ , з яких готували 1 моль/л водні розчини. З метою з'ясування впливу умов проведення синтезу на склад продуктів заміщених ГАП застосовано два підходи: повільне (серія I) або швидке (серія II) змішування комбінованого розчину фосфату і карбонату натрію з розчином нітрату кальцію. Отриманий в обох випадках аморфний осад відстоювали, фільтрували та промивали на фільтрі 2 л дистильованої води (до відсутності якісної реакції на нітрат-іон). Далі зразки висушували на повітрі при 80 °С (24 год) та піддавали термообробці при різних температурах (400, 550, 700 °С) 1 год.

© Н. Ю. Струтинська, І. В. Затовський, М. С. Слободяник, А. І. Малишенко, Б. Г. Місчанчук, О. А. Беда, 2014

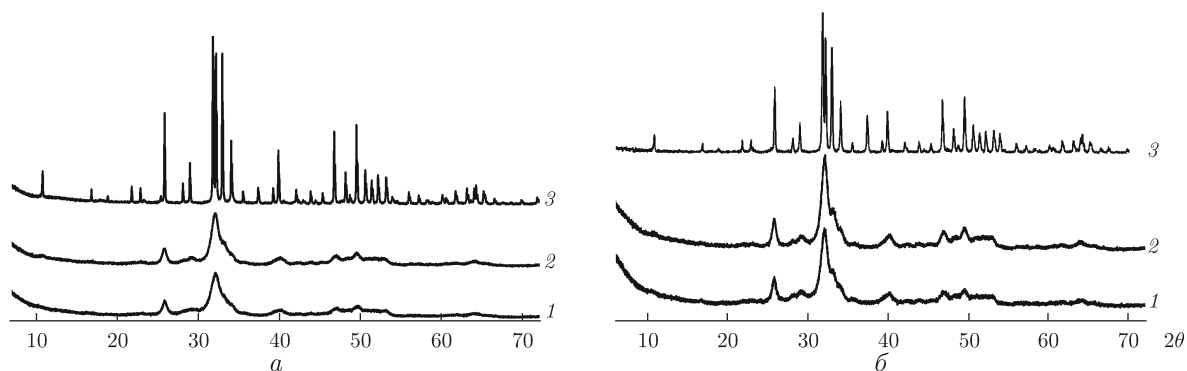


Рис. 1. Приклади рентгенограм зразків серії I ( $\text{CO}_3^{2-}/\text{PO}_4^{3-}$  дорівнює 1) (а) та серії II ( $\text{CO}_3^{2-}/\text{PO}_4^{3-}$  дорівнює 3) (б), висушених при  $80\text{ }^\circ\text{C}$  (1) й термооброблених при  $400\text{ }^\circ\text{C}$  (2) або  $700\text{ }^\circ\text{C}$  (3)

Синтезовані карбонатвмісні ГАП було схарактеризовано з використанням методів: порошкової рентгенографії (дифрактометр “Shimadzu XRD-6000” з графітовим монохроматором, метод  $2\theta$  безперервного сканування зі швидкостями 1 або 2 град/хв;  $2\theta = 5,0\text{--}80,0^\circ$ ), ІЧ спектроскопії (спектрометр “Nicolet Nexus FTIR” для запресованих зразків у таблетках КВг діапазон зйомки  $400\text{--}4000\text{ см}^{-1}$ ), температурно-програмованої десорбційної мас-спектрометрії (мас-спектрометр MX 7304A). Елементний склад синтезованих зразків встановлено за результатами енергодисперсійного рентгеноспектрального аналізу.

За результатами порошкової рентгенографії отримані продукти взаємодії є рентгеноаморфними (рис. 1), за винятком зразків серії I (у випадку вихідних співвідношень  $\text{CO}_3^{2-}/\text{PO}_4^{3-}$  дорівнює 2 й 3), що містили карбонат кальцію як домішку. Утворення  $\text{CaCO}_3$  призвело до зменшення виходу ГАП, порівняно з іншими зразками. У рентгенограмах, термооброблених при  $400\text{ }^\circ\text{C}$  ГАП, спостерігаються два широкі гало у діапазоні  $2\theta = 25\text{--}28^\circ$  і  $2\theta = 30\text{--}35^\circ$ , з яких відбувається поступове виділення окремих, характерних ГАП, рефлексів у випадку зразків, нагрітих понад  $550\text{ }^\circ\text{C}$  (див. рис. 1). Це свідчить про початок агломерації кристалітів та виникнення упорядкованості дальнього порядку. Рентгенограми зразків термооброблених при  $700\text{ }^\circ\text{C}$  містять повний набір характерних ГАП рефлексів, а розраховані параметри елементарних комірок отриманих сполук наведено у табл. 1.

Згідно з літературними даними [11–13], карбонатні групи у матриці ГАП можуть знаходитися у двох позиціях: замінні гідроксильні групи (А-тип) або фосфатні (В-тип). При реалізації заміщення за А-типом в ІЧ-спектрах карбонатна група характеризується дублетом при  $1545$  й  $1450\text{ см}^{-1}$  (асиметричні коливання) та синглетом при  $880\text{ см}^{-1}$ , а для В-типу відповідні коливальні моди знаходяться при  $1455$ ,  $1410$  та  $875\text{ см}^{-1}$ . В ІЧ-спектрах усіх вихідних зразків спостерігаються смуги, які відповідають коливальним модам:  $\text{PO}_4$ -тетраедрів у частотних областях  $1000\text{--}1100\text{ см}^{-1}$  ( $\nu_1$  і  $\nu_3$ ) і  $560\text{--}600\text{ см}^{-1}$  ( $\nu_4$ ),  $\text{CO}_3$ -груп — діапазони

Таблиця 1. Параметри елементарних комірок для синтезованих карбонатвмісних ГАП (пр. гр.  $P6_3/m$ )

Серія зразка	Вихідне співвідношення $\text{CO}_3^{2-}/\text{PO}_4^{3-}$	Параметри комірки, нм	
		<i>a</i>	<i>c</i>
I	1	0,94119	0,68919
II	1	0,94150	0,68881
II	2	0,94035	0,68935
II	2	0,94066	0,68896

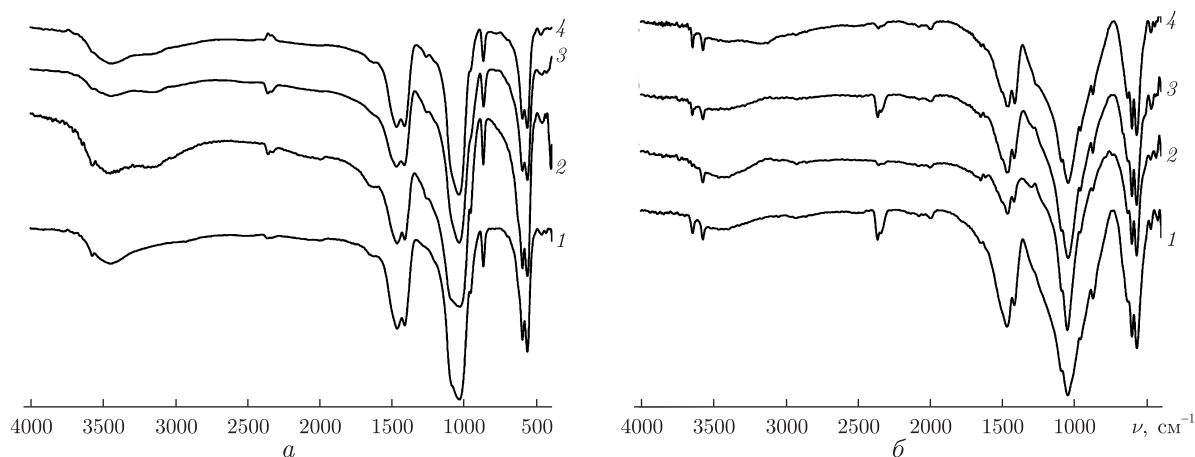


Рис. 2. ІЧ-спектри висушених при 80 °С (а) та термооброблених при 700 °С (б) зразків серії І ( $\text{CO}_3^{2-}/\text{PO}_4^{3-}$  дорівнює 1 (1)) та серії ІІ ( $\text{CO}_3^{2-}/\text{PO}_4^{3-}$  дорівнює: 1 (2); 2 (3); 3 (4))

1500–1400  $\text{cm}^{-1}$  ( $\nu_3$ ) і 880–870  $\text{cm}^{-1}$  ( $\nu_2$ ) та  $\text{OH}^-$ -груп — близько 3480 й 600  $\text{cm}^{-1}$  (рис. 2). За частотним положенням смуг, які відповідають коливанням карбонатних груп, у нашому випадку отримано карбонатвмісні ГАП з пріоритетним заміщенням фосфатних груп (В-тип), ступінь якого зростає зі збільшенням вмісту карбонату у вихідному розчині (інтенсивність смуг  $\text{CO}_3$ -груп зростає відносно відповідних для  $\text{PO}_4$ -тетраєдрів). В ІЧ-спектрах зразків, які нагрівали до 550 °С, істотно зменшується інтенсивність коливальних мод  $\text{OH}^-$ -груп, а при термообробці 700 °С також зменшуються інтенсивності смуг, які належать  $\text{CO}_3$ -групам (див. рис. 2).

За результатами елементного аналізу встановлено, що синтезовані зразки містять кальцій, фосфор, карбон та натрій. Вміст натрію й карбону в отриманих сполуках обох серій зростає у міру збільшення концентрацій іонів  $\text{Na}^+$  й  $\text{CO}_3^{2-}$  у вихідних розчинах (вміст натрію в межах 0,6–2,1% за масою, карбонат-іона від 5,0 до 6,6% за масою). Таким чином, результати елементного аналізу та ІЧ спектроскопії свідчать на користь реалізації схеми гетеровалентного заміщення за принципом  $\text{Ca}^{2+} + \text{PO}_4^{3-} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{CO}_3^{2-}$ , а склад отриманих зразків відображає формула  $\text{Ca}_{10-x}\text{Na}_x(\text{PO}_4)_{6-y}(\text{CO}_3)_y(\text{OH})_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ .

Зміну маси зразків при їх термообробці на повітрі при різних температурах демонструє табл. 2. З метою виявлення особливостей термічних перетворень та ідентифікації продуктів, які при цьому утворюються, було проведено температурно-програмований десорбційний мас-спектрометричний аналіз. Згідно з даними, основна втрата води відбувається в температурному інтервалі від 70 до 200 °С (в умовах вакууму, положення максимуму піка, що відповідає масі 18, знаходиться близько 80 °С, рис. 3, а). Такий температурний інтервал треба відносити до втрати сорбованої води. Вище температури 500 °С спостерігається по-

Таблиця 2. Зміна маси синтезованих карбонатзаміщених ГАП при нагріванні при різних температурах

Серія зразка	Вихідне співвідношення $\text{CO}_3^{2-}/\text{PO}_4^{3-}$	$\Delta m$ , %		
		400 °С	550 °С	700 °С
І	1	9,2	11,8	12,1
ІІ	1	12,2	13,5	15,1
ІІ	2	9,4	10,8	15,5
ІІ	3	7,2	9,0	16,3

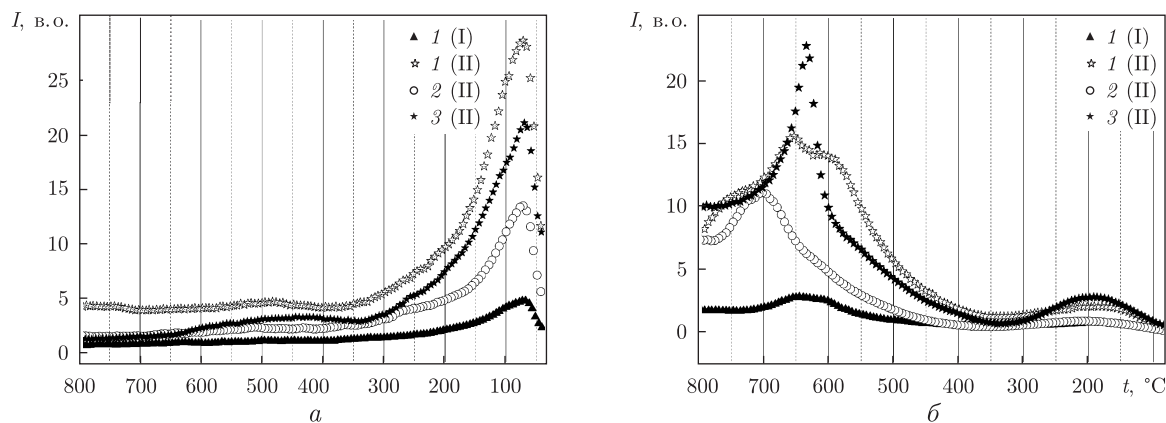


Рис. 3. Результати температурно-програмованої десорбційної мас-спектрометрії для  $\text{H}_2\text{O}$  ММ 18 (а) та  $\text{CO}_2$  ММ 44 (б).

I або II — серія зразка; 1–3 —  $\text{CO}_3^{2-}/\text{PO}_4^{3-}$  у вихідному розчині

чаток виділення  $\text{CO}_2$ , що відбувається в досить широкому інтервалі температур (див. б на рис. 3) з максимумами в області 600–720 °С, залежно від складу зразка. Отже, при термообробці зразків на повітрі при 400–550 °С втрата маси зумовлена видаленням води (7–12% за масою залежно від умов синтезу), що не призводить до переходу від аморфного стану до кристалічного. Формування полікристалічних ГАП відбувається після часткового видалення  $\text{CO}_2$  при нагріванні до 700 °С. При цьому втрата маси при нагріванні в інтервалі від 550 до 700 °С зростає зі збільшенням карбонат-іонів у синтезованому зразку.

Таким чином, застосований підхід до синтезу складнозаміщених ГАП, який включає отримання аморфного прекурсору та подальшу стадію його термічної обробки, розширює можливості варіювання вмісту замісників ( $\text{Na}^+$  й  $\text{CO}_3^{2-}$ ) у кристалічній матриці. Висока стабільність синтезованих аморфних продуктів передбачає перспективи їх використання у технологіях нанесення апатиту на поверхню металевих імплантатів для стоматології та ортопедії.

1. Aklil A., Mouftih M., Sebti S. Removal of heavy metal ions from water by using calcined phosphate as a new adsorbent // *J. Hazard. Mater.* – 2004. – **112**. – P. 183–190.
2. Takeuchi Y., Arai H. Removal of coexisting  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$  and  $\text{Cd}^{2+}$  ions from water by addition of hydroxyapatite powder // *J. Chem. Eng. Jpn.* – 1990. – **22**. – P. 75–80.
3. Matsumura Y., Moffat J. B. Partial Oxidation of Methane to Carbon-Monoxide and Hydrogen with Molecular-Oxygen and Nitrous-Oxide over Hydroxyapatite Catalysts // *J. Catal.* – 1994. – **148**. – P. 323–333.
4. Hyuk Jun J., Lee T.-J., Hoon L. T., Nam S.-W. et al. Nickel-calcium phosphate/hydroxyapatite catalysts for partial oxidation of methane to syngas: characterization and activation // *Ibid.* – 2004. – **221**. – P. 178–190.
5. Opre Z., Grunwaldt J.-D., Maciejewski M. et al. Promoted Ru-hydroxyapatite: designed structure for the fast and highly selective oxidation of alcohols with oxygen // *Ibid.* – 2005. – **230**. – P. 406–419.
6. Matsumura Y., Moffat J. B. Methanol adsorption and dehydrogenation over stoichiometric and non-stoichiometric hydroxyapatite catalysts // *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* – 1996. – **92**. – P. 1981–1984.
7. Bazi F., Badaoui H. El, Tamani S. et al. A facile synthesis of amides by selective hydration of nitriles using modified natural phosphate and hydroxyapatite as new catalysts // *Appl. Catal. A: Gen.* – 2006. – **301**. – P. 211–214.
8. Pappalardo R. G., Walsh J., Hunt R. B. Cerium-Activated Halophosphate Phosphors: I. Strontium Fluoroapatites // *J. Electrochem. Soc.* – 1983. – **130**. – P. 2087–2096.
9. Wopenka B., Pasteris J. D. A mineralogical perspective on the apatite in bone // *Mater. Sc. Eng.* – 2005. – **25**. – P. 131–143.

10. LeGeros R.Z. Calcium phosphates in oral biology and medicine // Monograph. Oral Sci. – 1991. – 15. – P. 37–58.
11. Fleet M. E., Liu X. Type A-B carbonate chlorapatite synthesized at high pressure // J. Solid State Chem. – 2008. – 181. – P. 2494–2500.
12. Fleet M. E., Liu X. Location of type B-carbonate ion in type A-B carbonate apatite synthesized at high pressure // Ibid. – 2004. – 177. – P. 3174–3182.
13. Lee Y., Nahm Y. M., Matsuya S. et al. Characterisation of macroporous carbonate-substituted hydroxyapatite bodies prepared in different phosphate solutions // J. Mater. Sci. – 2007. – 42. – P. 7843–7849.

Київський національний університет  
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 22.07.2013

**Н. Ю. Струтинская, И. В. Затовский,**  
член-корреспондент НАН Украины **Н. С. Слободяник, А. И. Малишенко,**  
**Б. Г. Мисчанчук А. А. Беда**

### **Синтез и термические превращения сложнозамещенных карбонатсодержащих гидроксоапатитов**

*Синтезирован ряд сложнозамещенных ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ )-содержащих гидроксоапатитов в растворах системы  $\text{Na}^+ - \text{Ca}^{2+} - \text{NO}_3^- - \text{CO}_3^{2-} - \text{PO}_4^{3-}$  при различных концентрациях исходных компонентов и исследованы особенности их термических превращений при нагревании до 700 °С. Интерпретация полученных результатов проведена с использованием методов порошковой рентгенографии, ИК спектроскопии и температурно-программированной десорбционной масс-спектрометрии.*

**N. Yu. Strutynska, I. V. Zatovsky,**  
Corresponding Member of the NAS of Ukraine **M. S. Slobodyanik, A. I. Malysenko**  
**B. G. Mischanchuk, O. O. Byeda**

### **Synthesis and thermal transformation of complexly substituted carbonated hydroxyapatites**

*The complexly substituted ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ )-containing hydroxyapatites are prepared from aqueous solutions of the system  $\text{Na}^+ - \text{Ca}^{2+} - \text{NO}_3^- - \text{CO}_3^{2-} - \text{PO}_4^{3-}$  ( $\text{Ca/P} = 1.67$  and different molar ratios  $\text{CO}_3^{2-}/\text{PO}_4^{3-}$ ). The thermal transformation of the samples heated to 700 °C is investigated. The obtained compounds have been characterized by powder X-ray diffraction, FTIR-spectroscopy, and temperature-programmed desorption mass spectrometry.*



В. В. Туров, І. М. Тодор, Н. Ю. Лук'янова, Т. В. Крупська,  
А. П. Угнівенко, академік НАН України В. Ф. Чехун

## Вплив трифтороцтової кислоти на кластеризацію води в частково дегідратованій тканині печінки щурів з карциномою Герена

*Методом низькотемпературної  $^1\text{H}$  ЯМР спектроскопії досліджувався стан води в ліофілізованій тканині печінки щурів — інтактній та враженій карциномою Герена. Встановлено, що в інтактній тканині присутні шість типів кластерів води, які здатні розчиняти різну кількість трифтороцтової кислоти. У печінці пухлиноносія кластери SAW є більш однорідними, а їх розчинююча здатність щодо ТФОК та електронодонорних молекул істотно менша.*

Відомо, що зв'язування води з макромолекулами призводить до зміни їх конфігурації, ефективних розмірів і властивостей. Тому будь-яке варіювання білок-білкових, білок-ліпідних, ліпід-ліпідних зв'язків впливає на структуру гідратної компоненти біологічних систем, що спричиняє істотну модифікацію їх функціонального стану. Особливого змісту і значення набувають ці явища при патологічних процесах, зокрема канцерогенезі та прогресії пухлинної хвороби [1–6]. Ці дослідження можуть бути виконані за допомогою методу низькотемпературної  $^1\text{H}$  ЯМР спектроскопії [7–10], який дозволяє за величиною хімічного зсуву визначати ступінь асоційованості внутрішньоклітинної води, а за її здатністю до замерзання — зміни внутрішньої енергії, що зумовлено взаємодією води з розчиненими в ній низькомолекулярними речовинами та біополімерами.

У відповідності до результатів багаточисельних досліджень, підсумованих в монографіях [9–11], вода має кластерну будову, основу останньої складають кластери сильноасоційованої води розміром 1–3 нм, в яких упорядкованість молекул значно вища, ніж у проміжках між суміжними кластерами. Хімічний зсув протонів рідкої води ( $\delta_{\text{H}}$ ) менший, ніж для гексагонального льоду (тетрагональна структура,  $\delta_{\text{H}} = 7$  м. ч.) і становить близько 5 м. ч. Для виявлення впливу злоякісної трансформації на будову кластерів внутрішньоклітинної води може бути використана властивість кластеризованої води погано розчиняти полярні органічні речовини та сильні кислоти [11–13].

Мета роботи — вивчення зміни структури внутрішньоклітинної води в печінці інтактних щурів та тварин з карциномою Герена: в повітряному та органічному середовищах, що містять добавки трифтороцтової кислоти.

**Методи дослідження.** Тканина печінки була отримана від щурів лінії Вістар (інтактні щури і тварини з трансплантованою карциномою Герена вагою 180 г). Час після перещеплення пухлини 12 діб. Для експериментів брали по 5 г кожного зразка печінки, яку висушували, використовуючи метод ліофілізації. Після висушування вміст залишкової води не перевищував в обох зразках 5% маси. Фотографії зразків тканини (до висушування), що отримані на фазово-контрастному мікроскопі (Primo Star, Carl Zeiss, Німеччина), представлені на рис. 1. Зразки розрізняються розмірами клітинних утворень: більш однорідними для контрольного зразка.

---

© В. В. Туров, І. М. Тодор, Н. Ю. Лук'янова, Т. В. Крупська, А. П. Угнівенко, В. Ф. Чехун, 2014

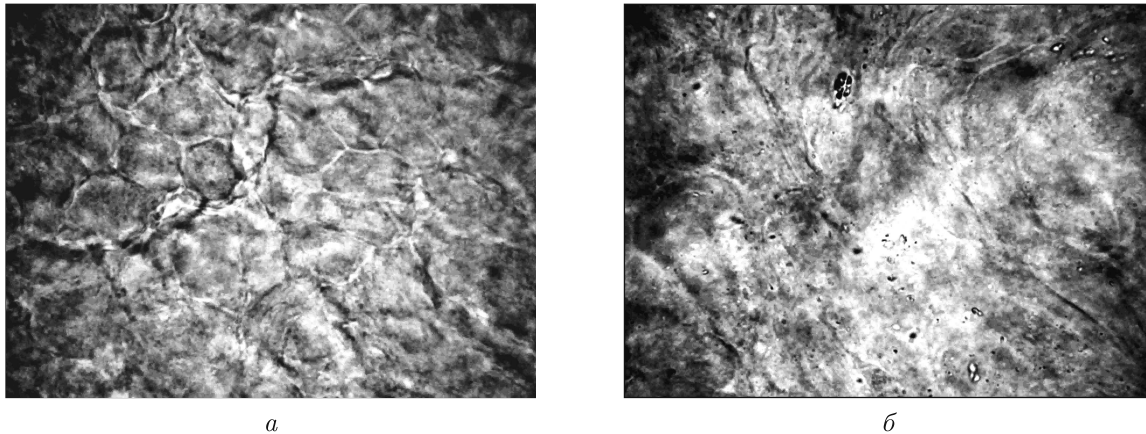


Рис. 1. Мікрофотографії тканин печінки щурів:  
*a* — інтактних, *б* — з перещепленою карциномою Герена 12 діб (Зб. 1000 з використанням імерсії)

Перед ЯМР-дослідженнями зразки розтирали в фарфоровій ступці до отримання гранул розміром 0,1–1,0 мм, що забезпечувало, з одного боку, слабе руйнування клітин, а з другого — рівномірне розміщення дослідного матеріалу в ампулі ЯМР-спектрометра. Після цього до зразків додавали певну кількість дистильованої води і врівноважували при кімнатній температурі 1–2 год. Максимальна гідратованість зразків становила 330 мг води на 1 г сухої тканини. Одні й ті самі зразки досліджувались на повітрі та з додатками органічних розчинників та трифтороцтової кислоти (ТФОК). Застосування дейтерованих розчинників ( $\text{CDCl}_3$ ,  $\text{CD}_3\text{CN}$ ,  $\text{DMSO-d}_6$ ) було зумовлене прагненням максимально нейтралізувати сигнали протонів органічних розчинників, інтенсивність яких може значно перевищувати інтенсивність сигналу води.

Спектри ЯМР знімали на ЯМР-спектрометрі Varian Mercury 400 з робочою частотою 400 МГц. Температуру регулювали з точністю  $\pm 1$  К, використовуючи термоприставку Bruker VT-1000. Інтенсивність сигналів визначали з точністю  $\pm 10\%$ . Для запобігання переохолодження суспензій спектри  $^1\text{H}$  ЯМР незамерзаючої води записували при нагріванні суспензій, попередньо охолоджених до температури 210 К.

**Результати та їх обговорення.** Рис. 2 ілюструє зняті при різних температурах спектри  $^1\text{H}$  ЯМР тканини печінки: інтактних (див. *a*, *в*) та з карциномою Герена щурів (див. *б*, *г*), що містили 330 мг/г залишкової води. При вибраному рівні гідратованості можна було вважати, що вся присутня в клітинному матеріалі вода є зв'язаною, тобто входить до складу гідратних оболонок біополімерних структур. У повітряному середовищі вид спектрів тканини печінки інтактних щурів та печінки пухлиноносіїв виявився подібним (див. *a*, *б*). Міжфазна вода знаходиться у вигляді кластерів сильноасоційованої води, хімічний зсув яких при температурі 290 К становить близько 5 м. ч., що близько до хімічного зсуву рідкої води. Із зниженням температури замерзання води зсув здійснюється при  $T < 260$  К, тобто вся наявна в тканині вода може бути кваліфікована як сильнозв'язана [9–11]. У міру замерзання води (при зниженні температури) її хімічний зсув збільшується, що може бути обумовлено зростанням упорядкованості води (наближення її структури до структури гексагонального льоду) та збільшенням впливу молекул води, що взаємодіють з сильними електронодонорними групами молекул біоматеріалу.

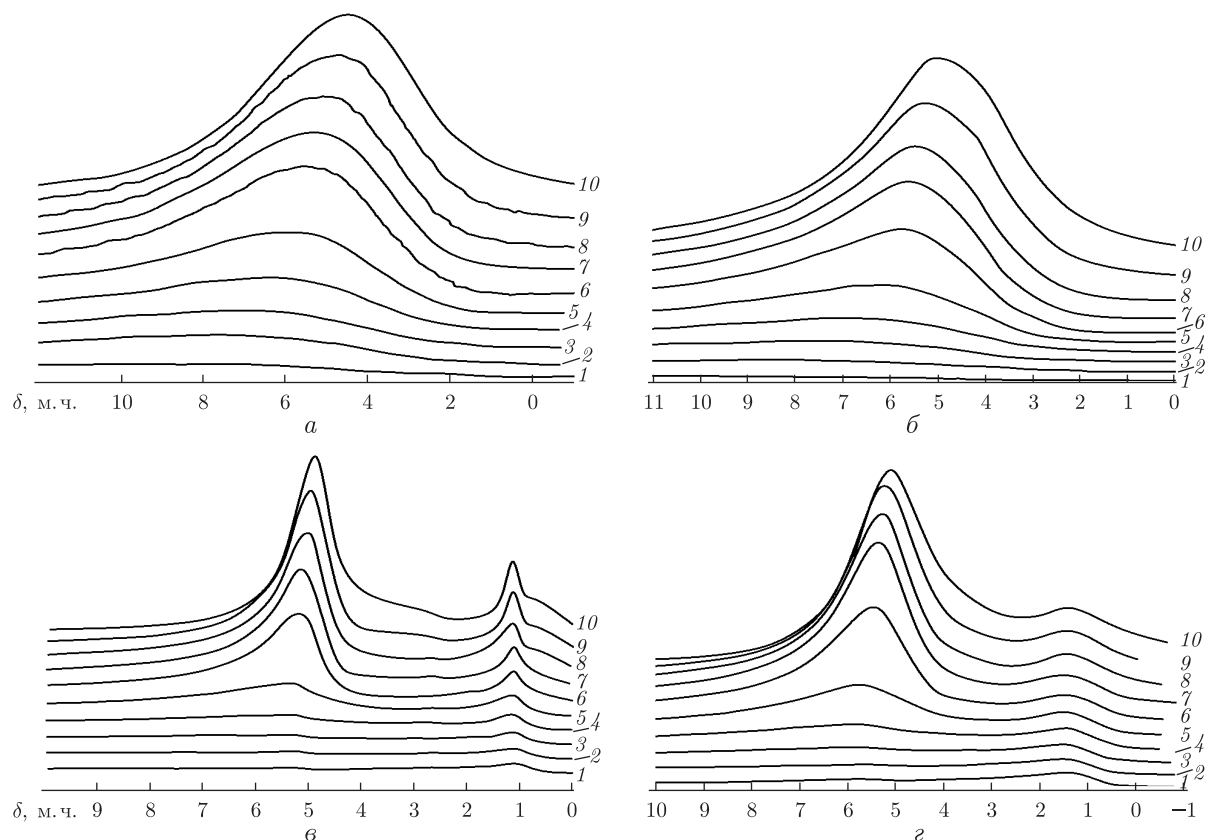


Рис. 2.  $^1\text{H}$  ЯМР-спектри печінки щурів інтактної та з карциною Герена знято при різних температурах: на повітрі: а — інтактна; б — пухлиноносія; в середовищі  $\text{CDCl}_3$ : в — інтактна; г — пухлиноносія. Тут і на рис. 3 і 4: температура спектрів, К: 1 — 210, 2 — 220, 3 — 230, 4 — 240, 5 — 250, 6 — 260, 7 — 265, 8 — 270, 9 — 280, 10 — 290

При введенні в клітини слабополярної речовини ( $\text{CDCl}_3$ ) вигляд спектрів змінюється (див. в, г на рис. 2). У них спостерігається сигнал сильноасоційованої води ( $\delta_{\text{H}} = 5,0\text{--}5,5$  м. ч.) та група сигналів у спектральній області ( $\delta_{\text{H}} = 0,9\text{--}3,5$  м. ч.), які для зразка інтактної тканини (див. в) реєструються окремо, а для печінки щурів з карциною Герена (див. г) — як один широкий сигнал. Імовірно, в цій спектральній області спостерігаються сигнали фосфоліпідів, жирних кислот, слабоасоційованої води та води, зв'язаної з електродонорними центрами поверхні біоматеріалу.

Додавання до дисперсійного середовища ТФОК у випадку інтактної тканини призводить до значного ускладнення вигляду спектрів. Сигнал сильноасоційованої води трансформується принаймні в шість сигналів, хімічний зсув яких знаходиться в інтервалі 4,0–10,5 м. ч. Це свідчить про утворення системи кластерів, що по-різному розчиняють ТФОК. Зокрема, найменш інтенсивний з сигналів SAW (сигнал 1 на рис. 3, а,  $\delta_{\text{H}} = 4$  м. ч.) відповідає кластерам сильноасоційованої води, що не розчиняє ТФОК, а впорядкованість сітки водневих зв'язків менша, ніж у рідкій воді. Сигнал 2 ( $\delta_{\text{H}} = 5$  м. ч.) має спектральні параметри, які при 290 К збігаються з параметрами води у відсутності ТФОК. Однак зі зниженням температури і частковим замерзанням міжфазної води він розділяється на сигнали 2 й 3. При цьому хімічний зсув сигналу 2 залишається незмінним, а сигнал 3 зі зниженням температури зміщується в слабкі поля, що свідчить про збільшення вкладу в такий воді розчиненої

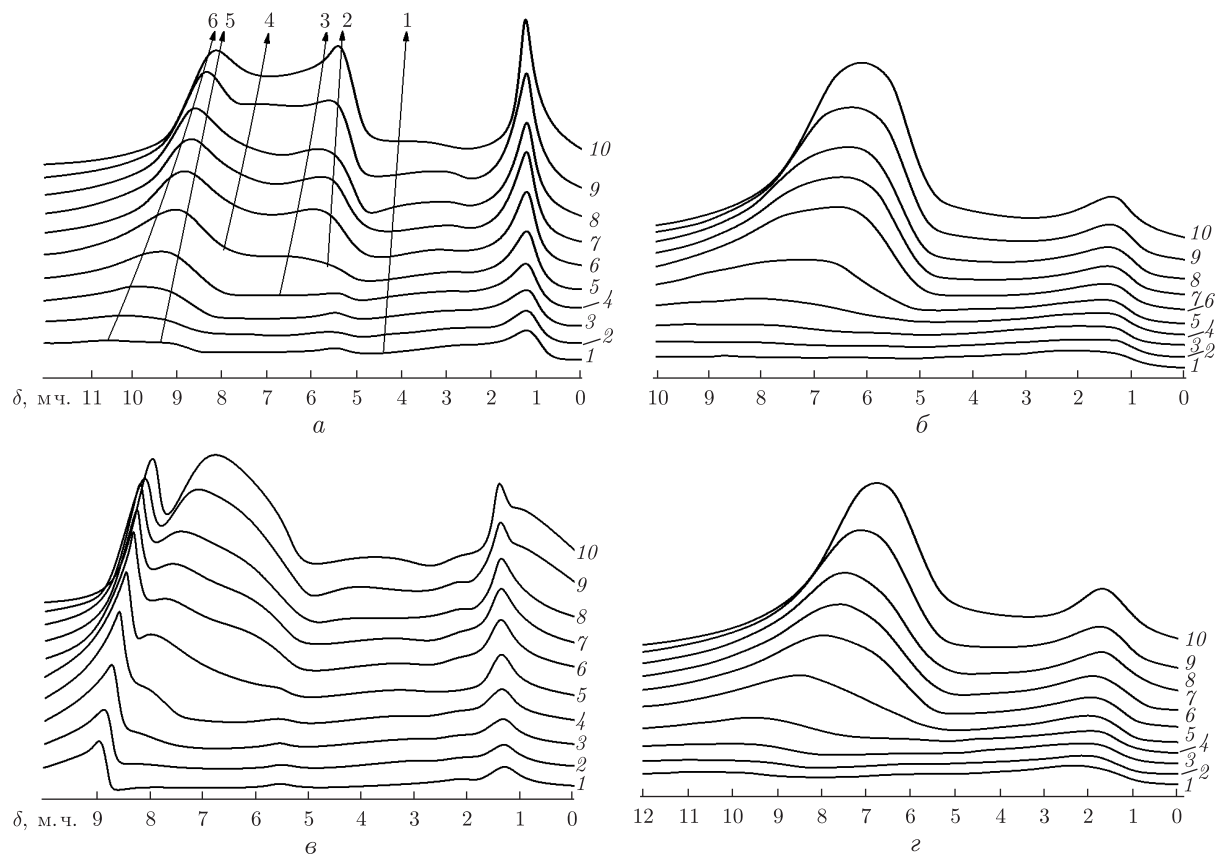


Рис. 3.  $^1\text{H}$  ЯМР-спектри знято при різних температурах у присутності трифтороцтової кислоти печінки щурів інтактної (а, в) та з карциномою Герена (б, г)

ТФОК. Імовірно це обумовлено вимерзанням води у вигляді чистого льоду і відповідного збільшення концентрації кислоти в залишковій воді. Така ж закономірність спостерігається і для зміни хімічного зсуву сигналів 4–6 (див. а на рис. 3), проте концентрація ТФОК у кластерах води, відповідальних за ці сигнали, є значно більшою.

На відміну від описаних закономірностей кластероутворення води в тканині печінки інтактних щурів за наявності ТФОК, у печінці щурів з карциномою Герена вид спектрів при тій самій кількості (330 мг/г) залишкової води істотно інший (див. б на рис. 3). При кімнатній температурі в спектрах фіксується лише два сигнали сильноасоційованої води: з хімічними зсувами  $\delta_{\text{H}} = 4$  м.ч. та  $\delta_{\text{H}} = 6,5$  м.ч. Перший з цих сигналів за своїми характеристиками збігається з сигналом 1 на рис. 3, а, а другий, — імовірно, є усередненим сигналом (2–6) для кластерів. При найбільш низькій температурі (210 К) вигляд спектрів для обох типів тканин стає близьким. Найбільш імовірно, що у печінці щурів з пухлиною утворюються більш однорідні кластери води з усередненим значенням розчинності в них ТФОК.

Додавання до дисперсійного середовища полярної компоненти ( $\text{CD}_3\text{CN}$ ) призводить до певного перерозподілу між інтенсивностями сигналів (2–6) в інтактній тканині (див. в рис. 3). Суттєво зростає інтенсивність сигналу 6, обумовленого кластерами зі значною концентрацією ТФОК. Їх стабілізації сприяє сольватуюча дія молекул ацетонітрилу. Спостерігається також зменшення інтенсивності сигналу 2 за рахунок зростання інтенсивності

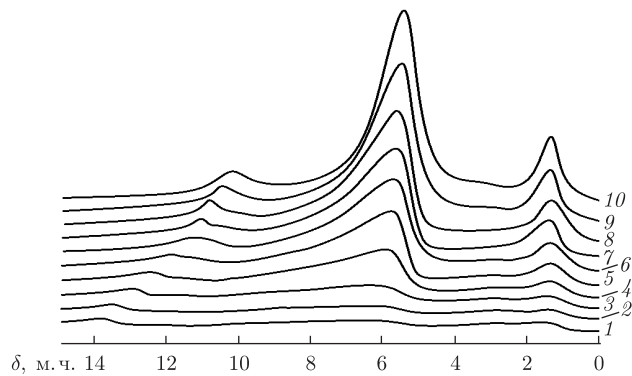


Рис. 4.  $^1\text{H}$  ЯМР-спектри тканини печінки щурів з карциномою Герена, що містила 330 мг/г залишкової води в середовищі хлороформу з додатками ТФОК та ДМСО знято при різних температурах

сигналів 3–5. У той самий час у печінці щурів з пухлиною цих змін не відбувається і спектри сигналу SAW залишаються подібними до спектрів у середовищі хлороформу (див. 2 на рис. 2) без додавання ТФОК та ацетонітрилу. Це свідчить про погану розчинність у міжфазній воді не тільки ТФОК, а й  $\text{CD}_3\text{CN}$ .

Відзначимо, що в присутності  $\text{CD}_3\text{CN}$  як в інтактній (див. 6 на рис. 3), так і у печінці щурів з карциномою Герена (див. 2) спостерігається зростання інтенсивності сигналу протонів у спектральному діапазоні  $\delta_{\text{H}} = 1\text{--}3$  м. ч. Це свідчить про зростання кількості слабоасоційованих форм води. Для інтактної тканини (див. 6) це є сигналом при  $\delta_{\text{H}} = 1$  м. ч. На жаль, для печінки щурів з пухлиною (див. 2) аналогічний сигнал SAW неможливо відокремити від сигналів фосфоліпідів, що мають ту саму величину хімічного зсуву.

З метою перевірки припущення про слабку розчинність полярних речовин у міжфазній воді печінки тварин з пухлиною нами було вивчено вплив на спектральні параметри SAW більш сильного електронодонорного розчинника — диметилсульфоксиду (ДМСО). Результати наведено на рис. 4.

Як впливає з даних рисунку, основний сигнал сильноасоційованої води має хімічний зсув  $\delta_{\text{H}}$  в діапазоні від 5,0 до 6,6 м. ч. Звертаючи увагу на значний надлишок присутніх у дисперсійному середовищі ТФОК і ДМСО, можна стверджувати, що вони майже не розчиняються у внутрішньоклітинній воді. Це свідчить про формування в клітинах компактних нанорозмірних кластерів води, розчинення в яких кислоти та полярних органічних речовин супроводжується значним збільшення внутрішньої енергії, що є енергетично не вигідним.

У спектрах на рис. 4 спостерігається кілька відносно слабких сигналів з  $\delta_{\text{H}} = 9\text{--}11$  м. ч. при кімнатній температурі, які збільшуються до  $\delta_{\text{H}} = 11\text{--}14$  м. ч. при 210 К. Сигнали, обумовлені водою, що знаходиться в клітинах печінки, імовірно не зазнали значного впливу карциноми Герена.

Таким чином, на даному етапі досліджень застосування методу  $^1\text{H}$  ЯМР-спектроскопії з пошаровим виморожуванням рідкої фази дозволяє визначити характеристики різних типів зв'язаної води та величину міжфазної енергії, яка опосередковано характеризує стан шарів води, зв'язаних з внутрішньою та зовнішньою поверхнею плазматичних мембран клітин.

При порівнянні спектральних характеристик сильноасоційованої води в печінці інтактних щурів та в печінці тварин з карциномою Герена спостерігаються значні відмінності.

В інтактній тканині присутні шість типів кластерів води, що здатні розчиняти різну кількість трифтороцтової кислоти. У печінці пухлиноносія кластери SAW є більш однорідними, а їх розчинювальна здатність відносно ТФОК та електронодонорних молекул істотно менша. Додавання до дисперсійного середовища полярної компоненти ( $CD_3CN$ ) спричинює певний перерозподіл між інтенсивностями сигналів різних форм внутрішньоклітинної води в інтактній тканині. Імовірно, що будова кластерів міжфазної води впливає не тільки на процеси розчинення кислот і полярних речовин, а й на перебіг багатьох біохімічних реакцій в клітинах у процесі їх життєдіяльності.

1. Чехун В. Ф., Михайленко В. М., Триндяк В. П. та ін. Оцінка вмісту структурованої води методом ЯМР-спектроскопії в плазматичних мембранах клітин карциноми Герена вихідних та з фенотипом резистентності до доксорубіцину: Матеріали Всеукр. наук.-практ. конф. з міжнародною участю "Молекулярні основи і клінічні проблеми резистентності до лікарських засобів" (Київ, 2–3 лист. 2006 р.) // Онкологія. – 2006. – Спец. вып. – С. 64.
2. Чехун В. Ф., Михайленко В. М., Чехун С. В., Чалий О. В. Аналіз особливостей структурованої води у плазматичних мембранах карциноми Герена з різною чутливістю до цис-дихлордіаміноплатини // Доп. НАН України. – 2008. – № 2. – С. 178–185.
3. Патологическая физиология / Под ред. А. Д. Адо, В. И. Пыцкого, Г. В. Порядина, Ю. А. Владимирова. – Москва: Триада-Х, 2000. – 574 с.
4. Theriault B. L., Nachtiga M. W. Human ovarian cancer cell morphology, motility, and proliferation are differentially influenced by autocrine TGF $\beta$  superfamily signalling // Cancer Lett. – 2011. – **313**. – P. 108–121.
5. Deberardinis R. J., Cheng T. Q's next: the diverse functions of glutamine in metabolism, cell biology and cancer // Oncogene. – 2010. – **29**, No 3. – P. 313–324.
6. Icard P., Poulain L., Lincet H. Understanding the central role of citrate in the metabolism of cancer cells // Rev. Art. Biochim. Biophys. Acta (BBA). Rev. Cancer. – 2012. – **1825**, Issue 1. – P. 111–116.
7. Turov V. V., Chehun V. F., Barvinchenko V. N. et al. Low-temperature  $^1H$ -NMR spectroscopic study of doxorubicin influence on the hydrated properties of nanosilica modified by DNA // J. Mater Sci, Mater Med. – 2011. – **22**. – P. 525–532.
8. Наноматериалы и нанокompозиты в медицине, биологии, экологии / Под ред. А. П. Шпака, В. Ф. Чехуна, сост. П. П. Горбик, В. В. Туров. – Киев: Наук. думка, 2011. – 444 с.
9. Гунько В. М., Туров В. В., Горбик П. П. Вода на межфазной границе. – Киев: Наук. думка, 2009. – 694 с.
10. Туров В. В., Гунько В. М. Кластеризованная вода и пути ее использования. – Киев: Наук. думка, 2011. – 313 с.
11. Gun'ko V. M., Turov V. V. Nuclear Magnetic Resonance Studies of Interfacial Phenomena. – New York: Taylor & Francis, 2013. – 1006 p.
12. Turov V. V., Gun'ko V. M., Turova A. A. et al. Interfacial behavior of concentrated HCl solution and water clustered at a surface of nanosilica in weakly polar solvents media // Colloids and Surface A: Physicochem. and Eng. Asp. – 2011. – P. 48–55.
13. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: В 4 т. Т. 1 / Под ред. В. П. Глушко. – Москва: Наука, 1978. – 495 с.

Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка  
НАН України, Київ  
Інститут експериментальної патології,  
онкології і радіобіології ім. Р. Є. Кавецького  
НАН України, Київ

Надійшло до редакції 16.07.2013

**В. В. Туров, И. Н. Тодор, Н. Ю. Лукьянова, Т. В. Крупская,  
А. П. Угнивенко, академик НАН Украины В. Ф. Чехун**

**Влияние трифторуксусной кислоты на кластеризацию воды  
в частично дегидратированной ткани печени крыс с карциномой  
Герена**

*Методом низкотемпературной  $^1\text{H}$  ЯМР спектроскопии исследовалось состояние воды в лиофилизированной ткани печени крыс — интактной и пораженной карциномой Герена. Установлено, что в интактной ткани присутствуют шесть типов кластеров воды, способных растворять разное количество трифторуксусной кислоты. В печени опухоленосителя кластеры SAW являются более однородными, а их растворяющая способность по отношению к ТФУК и электронодонорным молекулам существенно меньше.*

**V. V. Turov, I. N. Todor, N. Yu. Lukianova, T. V. Krupskaya,  
A. P. Ugnivenko, Academician of the NAS of Ukraine V. F. Chekhun**

**Effect of trifluoroacetic acid on the water clustering in partially  
dehydrated rat liver with Guerin carcinoma**

*The state of water in lyophilized liver tissue of rats, intact and impressed by Guerin carcinoma is investigated by the method of low-temperature  $^1\text{H}$  NMR spectroscopy. It was found that six types of water clusters that can dissolve different amounts of trifluoroacetic acid are present in intact tissue. In the liver tumor, clusters SAW are more homogeneous, and their solvent abilities are significantly smaller with respect to TFA and electron-donor molecules.*

Член-корреспондент НАН Украины В. В. Шевченко, А. В. Стрюцкий,  
Н. С. Клименко, Ю. В. Яковлев

## Протонная олигомерная ионная жидкость гиперразветвленного строения

*Разработан метод синтеза протонной анионоактивной гиперразветвленной олигомерной ионной жидкости (ОИЖ) на основе гиперразветвленного сложного олигоэфирполиола второй генерации. Химическое строение данного соединения исследовано методами ИК и  $^1\text{H}$  ЯМР спектроскопии. Температура стеклования полученного соединения равна  $-9,2^\circ\text{C}$ , а начало термоокислительной деструкции составляет  $270^\circ\text{C}$ . Ионная проводимость синтезированной ОИЖ в безводной среде характеризуется величинами  $6,44 \cdot 10^{-5}$  См/см при  $20^\circ\text{C}$  и  $3,22 \cdot 10^{-3}$  См/см при  $100^\circ\text{C}$ .*

К органическим ионным жидкостям относятся соли органических соединений с температурой плавления ниже  $100^\circ\text{C}$  [1]. Благодаря комплексу уникальных свойств, связанных с их химической и электрохимической стабильностью, низким давлением паров, высокой ионной проводимостью, растворяющей способностью и др., они нашли широкое практическое применение [1–3]. Синтезируемые на основе способных к полимеризации низкомолекулярных ионных жидкостей полимерные ионные жидкости привели к созданию нового типа полимерных электролитов, объединяющих свойства ионных жидкостей с макросвойствами полимерных систем [4, 5]. Последнее открыло новые перспективы использования таких соединений, однако за редким исключением была утрачена возможность их существования в жидком агрегатном состоянии [4, 5]. В этом аспекте полимерные ионные жидкости корректнее называть полимерными аналогами ионных жидкостей [6]. Как и низкомолекулярные ионные жидкости, их полимерные аналоги делятся на протонные и апротонные, а в их рамках, в отличие от первых, подразделяются на анионные и катионные [4, 5].

Учитывая возможности олигомеров как особого состояния конденсированной фазы, можно ожидать реализации нового комплекса свойств при придании ионным жидкостям олигомерной формы. Однако исследования в данной области носят фрагментарный характер, имеются только немногочисленные публикации [7–10]. При этом термин олигомерные ионные жидкости или аналоги ему не употребляется. К таковым по аналогии с низкомолекулярными ионными жидкостями мы относим ионсодержащие олигомеры, находящиеся в жидком состоянии ниже  $100^\circ\text{C}$ .

В поисках эффективных ионпроводящих сред нами развивается направление создания олигомерных ионных жидкостей (ОИЖ) различного химического состава и молекулярной архитектуры. В этом плане привлекательными являются соединения гиперразветвленного строения, позволяющие достигать высокой плотности ионных групп в своем составе [7]. Отметим, что если для апротонных аналогов ОИЖ гиперразветвленного строения (в том числе жидкого [8]) имеется несколько публикаций [7–9], то протонные ОИЖ гиперразветвленного строения в литературе не описаны. Разработке способа получения первого представителя данного типа ОИЖ и исследованию его свойств посвящено настоящее исследование.

**Экспериментальная часть.** Циклический ангидрид 2-сульфобензойной кислоты (“Aldrich”  $\geq 95\%$ ), N-метилимидазол (“Aldrich”, 99%) использованы без дополнитель-



ной очистки; гиперразветвленный алифатический олигоэфирполиол (НВР) Boltorn<sup>®</sup>Н30 (“Perstorp” Sweden) ММ 3500 [эквивалентная молекулярная масса полимера по гидроксильным группам, определенная методом ацилирования, составляет 117 г/г-экв] очищали путем переосаждения из ацетона в эфир с последующей сушкой в вакууме при температуре 25–30 °С в течение 6 ч; диметилформамид (ДМФА) перегнан при остаточном давлении 1–3 мм рт. ст.

Сульфопроизводное гиперразветвленного НВР-SO<sub>3</sub>H получено взаимодействием 1,51 г (0,0135 г-экв) НВР Boltorn<sup>®</sup>Н30 с 2,49 г (0,0135 г-экв) циклического ангидрида 2-сульфобензойной кислоты в 7 мл ДМФА при 80–90 °С в токе азота, согласно с ранее разработанной методикой [11]. Полученное соединение представляет собой прозрачно-коричневое вязкое вещество. Выход продукта 94%, содержание сульфокислотных групп, определенное методом обратного кислотного титрования, 25,1%; расчетное — 26,8%.

Синтез гиперразветвленной ОИЖ [НВР-SO<sub>3</sub>]<sup>-</sup>[Нmim]<sup>+</sup> осуществляли взаимодействием 4,00 г (0,0087 г-экв) гиперразветвленного производного олигоэфирполиола НВР-SO<sub>3</sub>H с 1,08 г (0,0131 г-экв) 1-метилимидазола в 16 мл ДМФА при комнатной температуре в течение суток. Растворитель удаляли при пониженном давлении, полученный продукт отмывали диэтиловым эфиром от 1-метилимидазола, который не вступил в реакцию. Синтезированную ОИЖ сушили в вакууме при 65–70 °С до постоянной массы. Полученное соединение представляет собою вязкую коричневую жидкость выше температуры 15 °С. Выход продукта 79,3%.

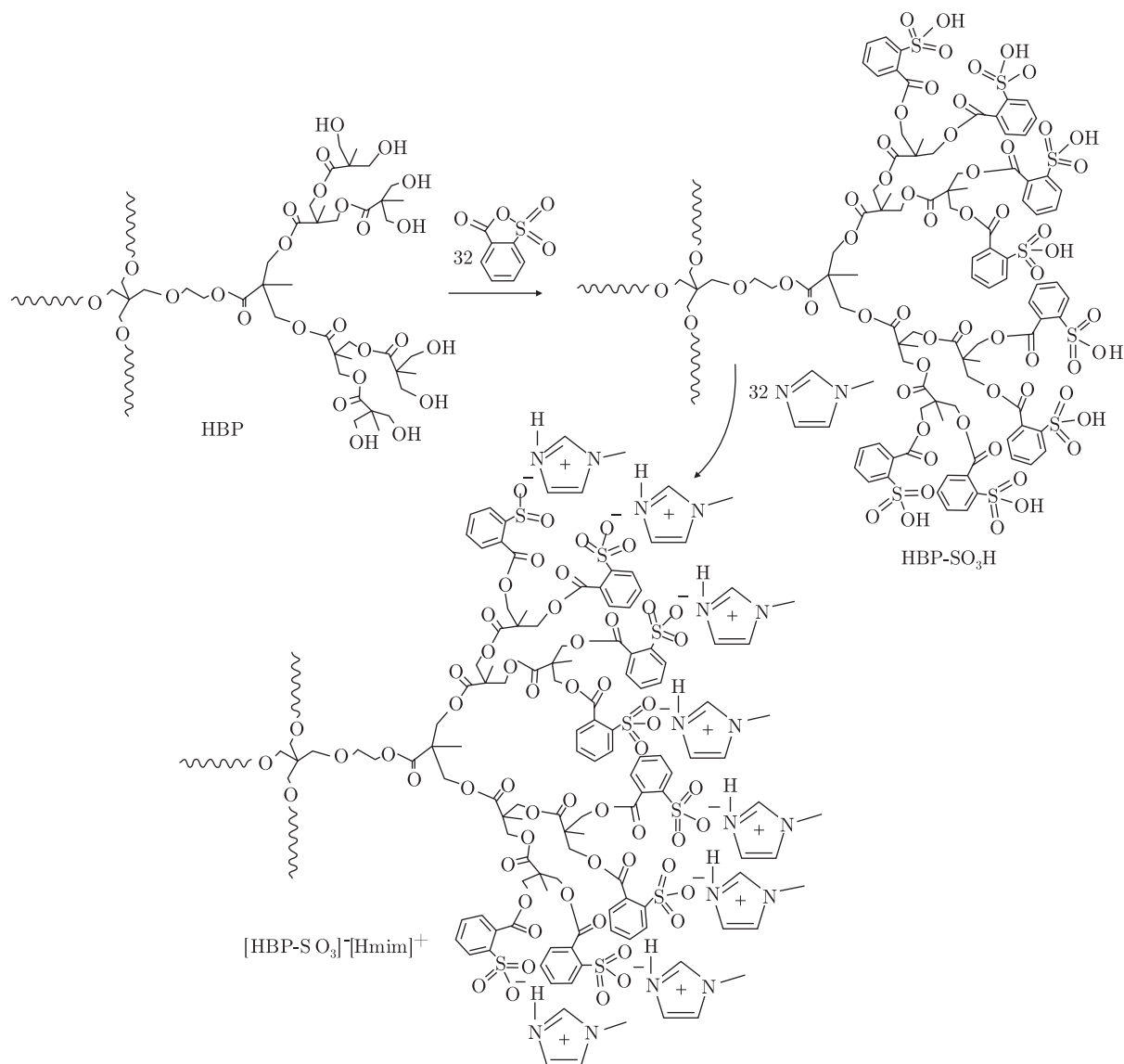
ИК-спектры с преобразованием Фурье сняты на спектрофотометре “TENSOR 37” в спектральной области 600–4000 см<sup>-1</sup>, <sup>1</sup>H ЯМР-спектры — на приборе “Varian” VXR-400 MHz с использованием растворителя ДМСО-d<sub>6</sub>.

Теплофизические свойства синтезированных соединений изучали методами термогравиметрического анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии. Потерю массы и температуру начала термоокислительной деструкции (*T<sub>d</sub>*) определяли при помощи прибора Q50 (TA Instruments, USA) в интервале температур от комнатной до 700 °С со скоростью нагрева 20 °С/мин в атмосфере воздуха; теплофизические характеристики — на приборе Q2000 (TA Instruments, USA) на воздухе в интервале температур от 90 до 200 °С со скоростью нагрева 20 °С/мин.

Ионная проводимость ( $\sigma_{dc}$ ) синтезированных ОИЖ измерена методом диэлектрической релаксационной спектроскопии при 20–120 °С с использованием диэлектрического спектрометра на основе моста переменного тока Р5083 с двухэлектродной ячейкой из нержавеющей стали. Частотный диапазон измерений составлял 0,1–100 кГц. Перед началом исследования образцы прогревали до 100 °С в течение 30 мин в токе сухого азота для удаления влаги, сорбированной из воздуха. Измерения проводились в токе сухого азота.

**Результаты и их обсуждение.** В основу синтеза протонной ОИЖ гиперразветвленного строения положено введение в оболочку гиперразветвленного олигоэфирполиола сульфокислотных групп с последующей их нейтрализацией N-метилимидазолом (mim). В качестве исходного соединения брали гиперразветвленный олигоэфирполиол второй генерации, полученный взаимодействием этоксилированного пентаэритрита с 2,2-диметилпропионовой кислотой и содержащий в оболочке 32 гидроксильные группы [2]. Введение сульфокислотных групп осуществлялось его реакцией с циклическим ангидридом 2-сульфобензойной кислоты в соотношении ОН : ангидрид = 1 : 1, а для их нейтрализации использовали типичное для низкомолекулярных ионных жидкостей основание — производное имидазола. Близость рассчитанной и установленной экспериментально величин содержания SO<sub>3</sub>H-групп в по-

лученной гиперразветвленной сульфокислоте свидетельствует о нахождении примерно 32 сульфогрупп в синтезированном соединении, а, следовательно, такого же количества сульфонатимидазолиевых групп в составе целевого продукта ОИЖ  $[\text{HBP-SO}_3]^- [\text{Hmim}]^+$  на его основе:



Синтезированное соединение является вязкой жидкостью при комнатной температуре, растворимой в воде, спиртах, ацетоне, диметилформамиде, диметилсульфоксиде, хлорированных растворителях, и не растворимой в простых и сложных эфирах, тетрагидрофуране, алифатических и ароматических растворителях. В ИК-спектре  $[\text{HBP-SO}_3]^- [\text{Hmim}]^+$  (рис. 1) наблюдаются полосы поглощения  $\nu \text{S=O}$  при  $980\text{--}1225 \text{ см}^{-1}$ ,  $\nu_{\text{sy as}} \text{S=O}$  при  $1000\text{--}1420 \text{ см}^{-1}$ ,  $\nu [\text{C-H}]$  связей  $\text{CH}_2$ -групп  $2840\text{--}3000 \text{ см}^{-1}$ ,  $\delta \text{C-H}$  связей  $\text{CH}_2$ -групп при  $1450\text{--}1475 \text{ см}^{-1}$ ,  $\nu \text{C-H}$  связей имидазолиевого катиона при  $3070$  и  $3140 \text{ см}^{-1}$ ,  $\nu_{\text{ar}} \text{C-H}$  при  $3030\text{--}3080 \text{ см}^{-1}$ ,  $\nu_{\text{ar}} \text{C-C}$  при  $1575\text{--}1625 \text{ см}^{-1}$ ,  $\nu \text{C=O}$  при  $1650\text{--}1790 \text{ см}^{-1}$ ,  $\nu_{\text{as}} \text{C-O-C}$  при  $1000\text{--}1310 \text{ см}^{-1}$ ,  $\nu_{\text{comb}} \text{N}^+-\text{H}$  при  $3000\text{--}3700 \text{ см}^{-1}$  и  $\delta \text{N}^+-\text{H}$  при  $1460\text{--}1600 \text{ см}^{-1}$  [13].

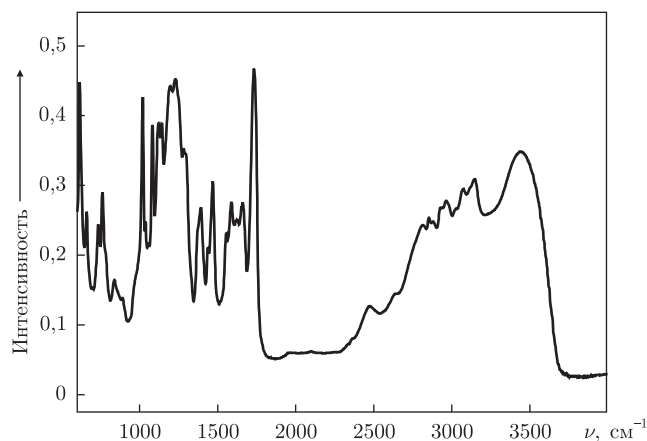


Рис. 1. ИК-спектр протонной ОИЖ [HBP-SO<sub>3</sub>]<sup>-</sup> [Hmim]<sup>+</sup>

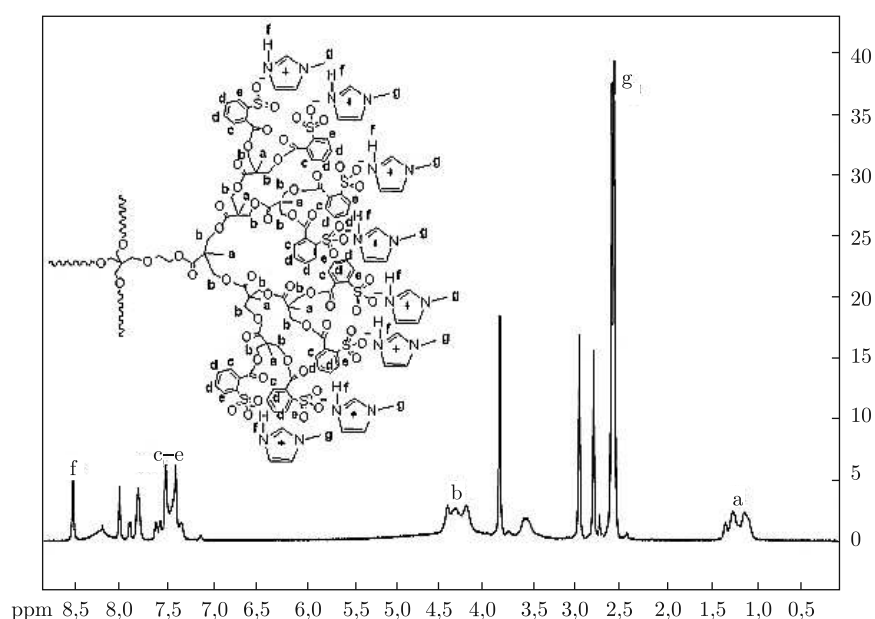


Рис. 2. <sup>1</sup>H ЯМР-спектр ОИЖ [HBP-SO<sub>3</sub>]<sup>-</sup> [Hmim]<sup>+</sup>

В <sup>1</sup>H ЯМР (DMCO-d<sub>6</sub>) спектре [HBP-SO<sub>3</sub>]<sup>-</sup> [Hmim]<sup>+</sup> (рис. 2) присутствуют сигналы протонов CH<sub>3</sub> [C-CH<sub>3</sub> 0,95–1,33 м. д. (a), N<sup>+</sup>-CH<sub>3</sub> 2,46–2,61 м. д. (g)], CH<sub>2</sub> 4,04–4,40 м. д. (b), протонов ароматического ядра 7,23–7,80 м. д. (c–e) и сигнал протона N<sup>+</sup>-H 8,47 м. д. (f) [13].

По результатам дифференциальной сканирующей калориметрии синтезированное соединение является аморфным с температурой стеклования –9,2 °С, относящейся к стеклованию олигоэфирной составляющей. Данные термогравиметрического анализа показывают, что начало интенсивной термоокислительной деструкции ОИЖ наблюдается при 270 °С.

Повышение проводимости синтезированного соединения, измеренной в безводных условиях, с увеличением температуры свидетельствует о ее ионном характере (рис. 3) [14]. При этом нелинейный характер данной зависимости в координатах Аррениуса указывает на осуществление протонного (ионного) переноса в такой системе главным образом за счет

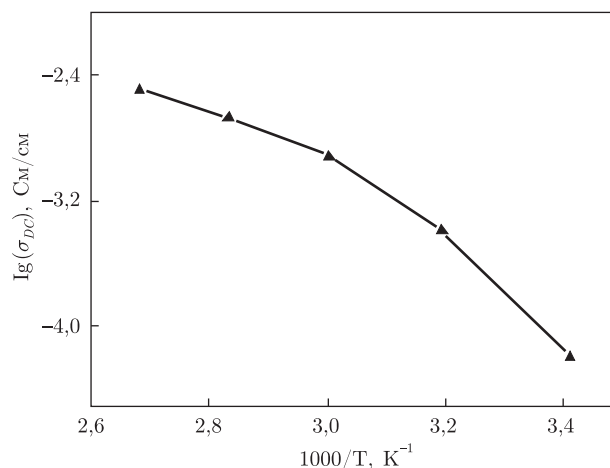


Рис. 3. Температурная зависимость проводимости ОИЖ

подвижности олигоэфирных цепей (механизма Гротгуса) [15]. Величина проводимости данной ОИЖ составляет  $6,44 \cdot 10^{-5}$  Cм/см при 20 °С и  $3,22 \cdot 10^{-3}$  Cм/см при 100 °С.

Известно, что ионная проводимость в таких системах зависит от количества носителей заряда и их подвижности, которая определяется температурой стеклования ионпроводящей фазы [3–6, 8–10]. Столь высокое значение проводимости при относительно высокой температуре стеклования свидетельствует о преобладающей роли количества носителей заряда. Так, для линейных апротонных ОИЖ уровень проводимости  $10^{-4}$  Cм/см достигается при значении температуры стеклования ниже  $-25$  °С [10].

Достигнутая величина проводимости данной ОИЖ сопоставима с таковой апротонных катионноактивных олигомерных аналогов ионных жидкостей на основе ароматического гиперразветвленного полиэфирполиола с концевыми 1-метилимидазолий гексафторфосфатными концевыми группами [9], которая составляет  $10^{-5}$ – $10^{-4}$  Cм/см при 30 °С и  $10^{-3}$  Cм/см при 80 °С).

Таким образом, нами разработан метод синтеза первого представителя протонной анионноактивной ОИЖ гиперразветвленного строения. Его характеристики термической стабильности и ионной проводимости представляют интерес для создания различных электрохимических устройств.

1. Hallett J. P., Welton T. Room-temperature ionic liquids: solvents for synthesis and catalysis. 2 // Chem. Rev. – 2011. – **111**, No 5. – P. 3508–3576.
2. Bideau J. L., Viau L., Vioux A. Ionogels, ionic liquid based hybrid materials // Chem. Soc. Rev. – 2011. – **40**, No 2. – P. 907–925.
3. Greaves T. L., Drummond C. J. Protic ionic liquids: properties and applications // Chem. Rev. – 2008. – **108**, No 1. – P. 206–237.
4. Meccerreyes D. Polymeric ionic liquids: broadening the properties and applications of polyelectrolytes // Progr. Polymer Sci. – 2011. – **36**, No 12. – P. 1629–1648.
5. Yuan J., Meccerreyes D., Antonietti M. Poly(ionic liquid)s: an update // Ibid. – 2013. – **38**, No 7. – P. 1009–10036.
6. Шаплов А. С., Понкратов Д. О., Власов П. С. и др. Синтез и свойства полимерных аналогов ионных жидкостей // Высокомолекулярные соединения. Сер. Б. – 2013. – **55**, № 3. – С. 336–353.
7. Kerscher B., Appel A.-K., Thomann R. et al. Treelike polymeric ionic liquids grafted onto graphene nanosheets // Macromolecules. – 2013. – **46**, No 11. – P. 4395–4402.
8. Schwab E., Mecking S. Synthesis and properties of highly branched polycations with an aliphatic polyether scaffold // J. Polym. Sci. Polym. Chem. – 2005. – **43**, No 19. – P. 4609–4617.

9. *Chen C., Fang X.* Synthesis and conductivity performance of hyperbranched polymer electrolytes with terminal ionic groups // *J. Appl. Polymer Sci.* – 2010. – **117**, No 6. – P. 3539–3544.
10. *Nakai Y., Ito K., Ohno H.* Ion conduction in molten salts prepared by terminal-charged PEO derivatives // *Solid State Ionics.* – 1998. – **113** – **115**. – P. 199–204.
11. *Шевченко В. В., Стрюцький А. В., Шевчук А. В., Клименко Н. С.* Синтез сульфопроизводного гиперразветвленного олигоэфирполиола // *Доп. НАН України.* – 2013. – № 6. – С. 140–144.
12. *Magnusson H., Malmström E., Hult A.* Structure buildup in hyperbranched polymers from 2,2-bis(hydroxymethyl)propionic acid // *Macromolecules.* – 2000. – **33**, No 8. – P. 3099–3104.
13. *Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольтер К.* Определение строения органических соединений. Таблицы спектральных данных. – Москва: Мир, БИНОМ; Лаб., знаний, 2006. – 438 с.
14. *Kyritsis A., Pissis P., Grammatikakis J.* Dielectric relaxation spectroscopy in poly(hydroxyethyl acrylates) / water hydrogels // *J. Polym. Sci.: Part B: Polym. Phys.* – 1995. – **33**, No 12. – P. 1737–1750.
15. *Gray F. M.* Solid Polymer Electrolytes: Fundamentals and Technological Applications. – New York: VCH, 1991. – 245 p.

*Институт химии высокомолекулярных соединений  
НАН Украины, Киев*

*Поступило в редакцию 26.09.2013*

Член-корреспондент НАН України **В. В. Шевченко, О. В. Стрюцький, Н. С. Клименко, Ю. В. Яковлев**

### **Протонна олигомерна іонна рідина гіперрозгалуженої будови**

*Розроблено метод синтезу протонної аніонактивної гіперрозгалуженої олигомерної іонної рідини (OIP) на основі гіперрозгалуженого олигоестерполіолу другої генерації. Хімічну будова даної сполуки досліджено методами ІЧ- й <sup>1</sup>H ЯМР спектроскопії. Температура склування отриманої сполуки дорівнює –9,2 °С, а початок термоокиснювальної деструкції становить 270 °С. Іонна провідність синтезованої OIP в безводному середовищі характеризується величинами  $6,44 \cdot 10^{-5}$  См/см при 20 °С та  $3,22 \cdot 10^{-3}$  См/см при 100 °С.*

Corresponding Member of the NAS of Ukraine **V. V. Shevchenko, A. V. Stryutskii, N. S. Klimenko, Yu. V. Yakovlev**

### **Hyperbranched protic oligomeric ionic liquid**

*A method of synthesis of protic anion-active hyperbranched oligomeric ionic liquid based on hyperbranched polyester polyol of the second generation is developed. The chemical structure of the compound is studied by IR and <sup>1</sup>H NMR spectroscopies. The glass transition temperature of the obtained compound is –9.2 °C, and the beginning of its thermal oxidative degradation is 270 °C. The ionic conductivity of the synthesized oligomeric ionic liquid is characterized by the values of  $6.44 \cdot 10^{-5}$  S/cm at 20 °C and  $3.22 \cdot 10^{-3}$  S/cm at 100 °C in anhydrous medium.*



УДК 57.044:616.34-006

О. М. Бабута, О. В. Линчак, В. К. Рибальченко

## Порівняння ефективності нової таргетної сполуки похідного малеїміду і цитостатика 5-фторурацилу при хемоіндукованому раку товстої кишки у щурів

(Представлено членом-кореспондентом НАН України В. Ф. Сагачем)

*Похідне малеїміду 1-(4-Cl-бензил)-3-Cl-4-(CF<sub>3</sub>-феніламіно)-1H-пірол-2,5-діон (MI-1) є достатньо ефективною сполукою порівняно з 5-фторурацилом при хемоіндукованому канцерогенезі товстої кишки щурів. MI-1 є перспективною сполукою для подальших досліджень і може стати основою для розробки нових антиканцерогенних препаратів таргетного спрямування.*

Рак товстої кишки є однією з найбільш поширених злоякісних пухлин. На його частку припадає 45% випадків захворювання на рак шлунково-кишкового тракту у жінок і 60% у чоловіків. Існують декілька шляхів патогенезу колоректального раку. У більшості випадків причиною виникнення цієї форми раку є хромосомна нестабільність, яка призводить до поступового перетворення від норми до аденом та карцином, в інших випадках причиною є нуклеотидна нестабільність. Мутації двох класів генів — пухлинних генів-супресорів і протоонкогенів — дають клітині проліферативну перевагу і сприяють розвитку злоякісного фенотипу [1–3].

Перспективними для лікування різних форм раку є таргетні препарати. Однією з таких сполук є похідне малеїміду — 1-(4-Cl-бензил)-3-Cl-4-(CF<sub>3</sub>-феніламіно)-1H-пірол-2,5-діон (MI-1), що має виражену цитостатичну активність по відношенню до культур трансформованих і пухлинних клітин, зокрема до культури аденокарциноми товстої кишки [4, 5].

У зв'язку з цим ми ставили на меті дослідження ефективності похідного малеїміду MI-1 у лікуванні хемоіндукованого раку товстої кишки щурів у порівнянні зі цитостатиком, що широко застосовується для лікування пухлин товстої кишки — 5-фторурацилом (5-Ф), а також їх комбінованого впливу.

Дослідження проведено на 60 білих щурах-самцях з масою 180–200 г, що утримувалися в стандартних умовах виварію. Для моделювання раку товстої кишки використовували 1,2-диметилгідразин (ДМГ), який вводили щотижнево протягом 20 тижнів у дозі 20 мг/кг,

© О. М. Бабута, О. В. Линчак, В. К. Рибальченко, 2014

що є достатнім для індукції і подальшого розвитку колоректального раку у щурів [6]. З 21-го тижня експерименту тварин було розділено на чотири групи: I — експериментальний контроль (нічого не отримували); II — отримували МІ-1 у дозі 2,7 мг/кг щодобово; III — отримували 5-Ф (45 мг/кг); IV — отримували МІ-1 у дозі 2,7 мг/кг щодобово в комбінації з 5-Ф (45 мг/кг). Тварин декапітували на 27-му тижні експерименту.

Відпрепаровану товсту кишку розрізали по всій довжині та аналізували за допомогою лупи: кількість, локалізацію та площу пухлин реєстрували за допомогою спеціальних схем [7]. Пухлини вирізували та фіксували в 10%-му нейтральному забуференому формаліні, піддавали стандартній гістологічній обробці, фарбували гематоксиліном з дофарбуванням еозином. Аналіз зрізів проводили за допомогою світлового мікроскопа Olympus BX-41.

Результати досліджень обробляли загальноприйнятими методами варіаційної статистики з використанням *t*-критерію Стьюдента. Результати наведено у вигляді середнього арифметичного (*M*) та стандартної похибки середнього арифметичного (*m*) для певної вибірки (*n*). Для відповідних розрахунків використовували стандартний пакет програм статистичного аналізу Microsoft Excel 2007.

У всіх експериментальних щурів були виявлені новоутворення в товстій кишці, переважна більшість пухлин локалізувалася в низхідному відділі товстої кишки, що є характерним для даної моделі канцерогенезу [6, 7]. Новоутворення мали різний розмір та форму: виступаючі, підійняті, плоскі, заглиблені, а також гранулярні та агранулярні. Пухлини були як з ендofітним, так і з екзофітним типом росту. Ендofітний тип росту переважав у тварин, які отримували лише ДМГ, екзофітний — у щурів, що отримували МІ-1 та МІ-1 з 5-Ф. Гістологічними дослідженнями було показано наявність аденом та аденокарцином. У щурів, які отримували похідне малеїміду МІ-1, переважну більшість пухлин становили аденоми. Загалом картина відповідала описаній у літературі для пухлин у щурів, викликаних ДМГ [6, 7]. У табл. 1 наведено результати дослідження впливу МІ-1 та 5-Ф при ДМГ-індукованому раку товстої кишки.

Таблиця 1. Ефективність похідного малеїміду МІ-1 та 5-фторурацилу при ДМГ-індукованому раку товстої кишки ( $M \pm m$ ;  $n = 15$ )

Відділ товстої кишки	Група			
	I	II	III	IV
Середня кількість пухлин на щура				
Сліпа	2,8 ± 0,4	1,3 ± 0,2*	1,8 ± 0,3	1,3 ± 0,3*
Ободова	11,5 ± 1,0	8,6 ± 0,7*	9,0 ± 0,4	7,1 ± 0,4*
Пряма	2,6 ± 0,3	1,9 ± 0,2	2,8 ± 0,4	1,4 ± 0,3*
Загалом	16,8 ± 1,0	11,8 ± 0,8*	13,5 ± 0,7	9,8 ± 0,5*
Середня площа пухлин, мм <sup>2</sup>				
Сліпа	9,6 ± 1,8	5,0 ± 1,0*	6,4 ± 1,0	4,7 ± 1,0*
Ободова	15,0 ± 2,0	11,6 ± 0,5	9,0 ± 0,5	13,3 ± 1,9
Пряма	22,0 ± 2,1	16,1 ± 2,0	18,6 ± 2,1	20,3 ± 3,9
Загалом	14,7 ± 1,2	11,4 ± 0,5*	10,3 ± 0,5*	13,7 ± 1,4
Загальна площа пухлин на одного щура, мм <sup>2</sup>				
Сліпа	30,3 ± 8,2	6,3 ± 1,2*	11,1 ± 2,0	6,1 ± 1,7*
Ободова	126,1 ± 10,6	100,9 ± 10,3	79,7 ± 1,8*	92,8 ± 12,7
Пряма	51,9 ± 5,1	29,2 ± 4,7*	45,8 ± 5,5	29,7 ± 5,8*
Загалом	208,3 ± 16,4	136,4 ± 12,9*	136,6 ± 6,1*	128,6 ± 8,8*

\*  $p < 0,05$  відносно контролю.

У сліпій кишці введення МІ-1 сприяло зменшенню площі пухлин на 48%, кількості пухлин на 52% та загальної площі ураження на 79% (див. табл. 1). При дії 5-Ф спостерігалася лише тенденція до зменшення даних показників. При сумісній дії МІ-1 з 5-Ф площа пухлин зменшувалася на 51%, їх кількість — на 55%, а загальна площа ураження — на 80%.

В ободовій кишці при введенні МІ-1 зменшувалася кількість пухлин на 26%, а також відмічалася тенденція до зменшення площі пухлин і загальної площі ураження на одного щура (див. табл. 1). При дії 5-Ф спостерігалася тенденція до зменшення площі і кількості пухлин, а загальна площа ураження зменшувалася на 37%. При сумісній дії МІ-1 з 5-Ф площа пухлин не відрізнялася від контрольних значень, кількість пухлин зменшувалася на 38%, а загальна площа ураження мала тенденцію до зменшення.

У прямій кишці при дії МІ-1 спостерігалася тенденція до зменшення площі і кількості пухлин (27%), а загальна площа ураження зменшувалася достовірно на 37% (див. табл. 1). При дії 5-Ф виявилася тенденція до зменшення площі і кількості пухлин та загальної площі ураження. При сумісній дії МІ-1 з 5-Ф площа пухлин не відрізнялася від контрольних значень, кількість пухлин зменшувалася на 47%, а загальна площа ураження — на 43%.

Загалом у товстій кишці застосування МІ-1 сприяло зменшенню площі пухлин на 22%, кількості пухлин на 30%, загальної площі ураження на 35% (див. табл. 1). При дії 5-Ф площа пухлин зменшувалася на 30%, спостерігалася тенденція до зменшення кількості пухлин, а загальна площа ураження зменшувалася на 34%. При сумісній дії МІ-1 з 5-Ф площа пухлин не відрізнялася від контрольних значень, кількість пухлин зменшувалася на 42%, а загальна площа ураження — на 38%.

Отже, у щурів усіх досліджених груп встановлено зменшення загальної площі пухлин на одного щура, істотної міжгрупової різниці не виявлено. У той же час механізми досягнення такого ефекту різні. Похідне малеїміду МІ-1 сприяло зменшенню середньої кількості, розміру та загальної площі пухлин товстої кишки в порівнянні з контролем. При дії 5-Ф спостерігалася лише тенденція до зменшення площі і кількості пухлин, а загальна площа пухлин зменшувалася достовірно. При комбінованому введенні МІ-1 з 5-Ф відбувалося достовірне зменшення кількості пухлин у всіх відділах товстої кишки, а також зменшувалася загальна площа пухлин, за рахунок зменшення їх площі. У тварин, що отримували МІ-1, переважали пухлини з екзофітним типом росту, і гістологічними дослідженнями вони були класифіковані як аденоми. При дії 5-Ф спостерігалися осередки відмирання клітин у пухлинах.

Таким чином, сполука МІ-1 має антипухлинні властивості, вона є перспективною для подальших досліджень та може стати основою для розробки нових антиканцерогенних препаратів таргетного спрямування.

1. *Edith P. Mitchell Targeted Therapy for Metastatic Colorectal Cancer: Role of Afibercept // Clinical Colorectal Cancer. – 2013. – 12, No 2. – P. 73–85.*
2. *Gryfe R., Swallow C., Vapat B. et al. Molecular biology of colorectal cancer // Curr. Probl. Cancer. – 1997. – 21, No 5. – P. 233–300.*
3. *Couturier D. Recent notions on intestinal cancerogenesis, their implications in genetic risk screening and preventive action of non-steroid anti-inflammatory agents // Bull. Acad. Natl. Med. – 2002. – 186, No 2. – P. 421–443.*
4. *Yablonska S., Filinska O., Ostrovska G. et al. Antiproliferative properties and low hepatotoxicity of new cytostatic maleimide derivate // Biochemistry of cell regulation: 33<sup>rd</sup> FEBS Congr. and 11<sup>th</sup> IUBMB Conf. – Athens, Greece, 2008. – P. 348.*
5. *Дубініна Г. Г., Головач С. М., Козловський В. О. та ін. Антипроліферативна дія нових похідних 1-(4-R-бензил)-3-R1-4-(R2-феніламіно)-1H-пірол-2,5-діону // Журн. орган. та фармацевт. хімії. – 2007. – 5, № 1. – С. 39–49.*



6. Perse M., Cerar A. The dimethylhydrazine induced colorectal tumours in rat – experimental colorectal carcinogenesis // Radiol. Oncol. – 2005. – **39**, No 1. – P. 61–70.
7. Pozharisski K. M. Tumours of the intestines // Pathology of Tumours in Laboratory Animals. – Lion: IARC, 1990. – Vol. 1. – P. 159–197.

ННЦ “Інститут біології” Київського національного  
університету ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 04.07.2013

**Е. Н. Бабута, О. В. Линчак, В. К. Рыбальченко**

**Сравнение эффективности нового таргетного соединения  
производного малеимида и цитостатика 5-фторурацила  
при хемоиндуцированном раке толстой кишки у крыс**

*Производное малеимида 1-(4-Cl-бензил)-3-Cl-4-(CF<sub>3</sub>-фениламино)-1H-пиррол-2,5-дион (MI-1) является достаточно эффективным соединением по сравнению с 5-фторурацилом при хемоиндуцированном канцерогенезе толстой кишки крыс. MI-1 является перспективным соединением для дальнейших исследований и может стать основой для разработки новых антиканцерогенных препаратов таргетного направления.*

**O. M. Babyta, O. V. Lynchak, V. K. Rybalchenko**

**Comparison of the effectivenesses of a new targeted compound  
maleimide derivative and cytostatic 5-fluorouracil in chemo-induced  
colon cancer in rats**

*The maleimide derivative 1-(4-Cl-benzyl)-3-Cl-4-(CF<sub>3</sub>-phenylamino)-1H-pyrrol-2,5-dione (MI-1) is quite efficient in comparison with 5-fluorouracil in rat chemo-induced colon carcinogenesis. MI-1 is a promising compound for the further research and can become a basis for developing new targeted anticancer drugs.*

І. А. Болюх, Г. В. Діденко, Є. Г. Шпак, О. П. Кузьменко,  
Г. С. Лісовенко, Г. П. Потебня

## Роль БТШ-пептидних комплексів у конструюванні протипухлинних вакцин

*(Представлено членом-кореспондентом НАН України В. Г. Ніколаєвим)*

*Одним із шляхів підвищення протипухлинної ефективності аутологічної вакцини є введення до її складу ксеногенного матеріалу, збагаченого білками теплового шоку (БТШ). Доведено антигенну гомологію БТШ з молекулярною масою 70 кДа, виділених із ксеногенної ембріональної та аутологічної пухлинної тканини. Досліджено протипухлинну ефективність вакцин, сконструйованих за допомогою БТШ-пептидних комплексів різного генезу. Дані вакцини за рівнем гальмування росту пухлинного вузла та антиметастатичним ефектом виявилися більш ефективними, ніж вакцини, виготовлені за традиційною технологією.*

Імунотерапія пухлин має досить тривалу історію, але й досі не вирішені питання, важливі для практичного застосування протипухлинних вакцин (ПВ) — це імунологічна толерантність організму до пухлинних антигенів [1], а також поява і накопичення в організмі онкологічного хворого низки порушень системи імунобіологічного нагляду [2, 3]. Одним з успішних шляхів ефективного впровадження вакцинотерапії в онкологічну практику є поєднане застосування разом з ПВ імунотропних речовин природного походження [4], серед яких особливе місце займають білки теплового шоку (БТШ).

БТШ мають унікальні імуномодулюючі властивості — по-перше, до них є рецептори на поверхні антигенпрезентуючих клітин, по-друге, вони, як шаперони, беруть участь у формуванні МНС-пептидних комплексів у пухлинних і антигенпрезентуючих клітинах. Крім того, вони стабілізують пухлинні антигени, утворюючи з ними міцні комплекси. При пухлинному процесі комплекси БТШ з пептидами клітини перебувають в клітинах практично постійно. Це дає підставу розглядати БТШ, з одного боку, як потужні стимулятори специфічної імунної відповіді, з іншого — як носії пухлинних антигенів [5]. Вплив високої температури (42–44 °С) на пухлинні клітини (ПК) призводить до підвищення експресії в них БТШ і, як наслідок, до підвищення імуногенності пухлинних антигенів, що стало основою для використання БТШ у різних технологіях виготовлення ПВ [6].

Ще одним способом підвищення ефективності ПВ є включення до її складу екстрактів ксеногенних ембріональних тканин, які містять велику кількість речовин, здатних стимулювати імунокомпетентні клітини [7]. Основними компонентами цих екстрактів є онкофетальні антигени, подібні до антигенів пухлин різного генезу. На нашу думку, можливість додавання ксеногенного матеріалу, збагаченого БТШ, до складу аутологічної ПВ посилить її імуногенність та дасть змогу створити більш ефективну вакцину.

Курачі ембріональні протеїни (КЕП) є зручним об'єктом для створення ксеногенної ПВ завдяки доступності матеріалу та відсутності в ньому патогенних для людини вірусів [8]. У попередніх дослідженнях нами було показано, що білкові екстракти з курячого ембріона (7-ї доби гестації) в імуноблот-тесті реагують із сироватками крові тварин з модельним

пухлинним процесом. Це стало підґрунтям для дослідження екстрактів з курячих ембріонів на наявність в них БТШ, адже спроба пошуку альтернативних джерел отримання БТШ для конструювання ефективних ПВ є важливою і актуальною задачею сучасної онкології.

Ми ставили за мету дослідити антигенну гомологію БТШ із ксеногенної ембріональної та аутологічної пухлинної тканини і вивчити протипухлинну ефективність вакцин, виготовлених за допомогою БТШ-пептидних комплексів, виділених з тканин різного генезу.

**Об'єкти і методи дослідження.** Дослідження проведені на мишах лінії C<sub>57</sub>B1 (самці, 2,5 міс.) розводки віварію Інституту експериментальної патології, онкології та радіобіології ім. Р. Є. Кавецького НАН України. Утримання мишей та робота з ними здійснювались у відповідності до міжнародних прийнятих правил поводження з експериментальними тваринами. Для відтворення пухлинних моделей використовували клітини раку Ерліха (РЕ) та карциноми легені Льюїс (КЛЛ), які вводили мишам внутрішньом'язово в праву задню кінцівку в дозі  $1 \cdot 10^6$  клітин в 0,3 мл фізіологічного розчину NaCl.

Індукцію БТШ у пухлинній тканині проводили шляхом прогрівання пухлини (до 1 см в діаметрі) при  $43,0 \pm 0,30$  °С з експозицією 1 год на експериментальному генераторі (434 МГц, "Istok", Російська Федерація). Пухлинний матеріал одержували через 24 год після гіпертермії — в оптимальний термін накопичення БТШ у тканині [9]. Для виділення білкових екстрактів з пухлинної та ембріональної тканин використовували метод висолювання білків сульфатом амонію; для поділу отриманих білкових екстрактів на окремі складові використано методи колонкової хроматографії на Sephacryl S-100 [10] та іонообмінної хроматографії з використанням ДЕАЕ-целюлози [11]. Білковий склад фракцій оцінювали за допомогою SDS-електрофорезу (метод Леммлі). Відбір фракцій здійснювали за наявністю в них БТШ з молекулярною масою 70 кДа (БТШ-70), вміст даних білків підтверджували методом імуноблот-тесту з використанням моноклональних антитіл до БТШ-70 фірми ENZO (США).

За допомогою продукту синтезу *Bacillus subtilis B-7025* (бактеріального метаболіту з молекулярною масою 70 кДа (БМ70), який має цитотоксичну дію по відношенню до пухлинних клітин у системі *in vitro* [12], та білкових екстрактів з пухлин, які зазнали впливу гіпертермії і без неї, а також з екстракту КЕП сконструйовано ряд вакцин. ПВ готували, виходячи із розрахунку за білком (0,3 мг екстракту ПК або КЕП та 0,3 мг відповідного БМ70 *B. subtilis B-7025* на 1 мл вакцини). Імунізацію тварин починали на 2-гу добу після перещеплення пухлини, проводили чотириразово (2-га, 5-та, 12-та та 19-та доба), разова доза ПВ становила 0,2 мг (0,8 мг на весь курс вакцинації).

У першому експерименті на пухлинній моделі РЕ було сформовано групи: 1 — контроль пухлинного росту; 2 — вакцина на основі екстракту ПК (без гіпертермії) та БМ70; 3 — вакцина на основі екстракту ПК (підданих гіпертермії) та БМ70; 4 — вакцина на основі екстракту КЕП та БМ70.

В експерименті на моделі КЛЛ формували такі групи: 1 — контроль пухлинного росту; 2 — очищені БТШ-пептидні комплекси, отримані з КЕП; 3 — очищені БТШ-пептидні комплекси, отримані з КЛЛ; 4 — вакцина на основі очищених БТШ-пептидних комплексів, отриманих з КЕП та БМ70; 5 — вакцина на основі очищених БТШ-пептидних комплексів, отриманих з КЛЛ та БМ70; 6 — вакцина на основі очищених БТШ-пептидних комплексів, отриманих з КЕП, КЛЛ та БМ70.

Порівняння впливу ПВ на перебіг пухлинного процесу оцінювали за показниками росту первинного вузла, виживаністю тварин та гальмуванням розвитку метастазів. Розраховували індекси інгібіції метастазування в порівнянні з відповідним контролем.

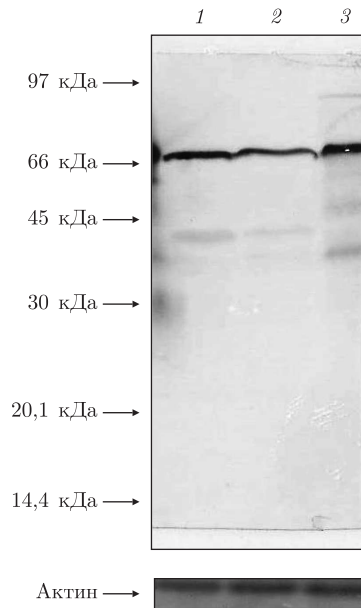


Рис. 1. Імуноблот-тест рівня БТШ-70 в ЕДТА-екстрактах, отриманих з пухлини (РЕ) після (1) і до (2) гіпертермії та ембріональних тканин курки (3)

**Результати та їх обговорення.** Перший етап роботи полягав у дослідженні наявності та визначенні рівня БТШ-70 в екстракті КЕП (7-ї доби гестації), а також порівнянні їх рівня з таким в ЕДТА-екстрактах ПК після гіпертермії. Варто зазначити, що попередньо нами було підтверджено наявність БТШ-70 у ЕДТА-екстрактах з клітин РЕ та показано, що гіпертермія пухлин сприяє збільшенню рівня БТШ-70 у 1,46 раза [13].

Методом імуноблот-тесту при дослідженні рівня БТШ-70 в ЕДТА-екстрактах КЕП виявлено досить високий його показник, що значно перевищував (у 1,68 раза) відповідний рівень у ЕДТА-екстрактах тканин РЕ, які попередньо піддавалися локальній гіпертермії (рис. 1). Ці дані можуть слугувати переконливим доказом доцільності використання ембріональних тканин курки як зручного джерела отримання БТШ-70 при конструюванні ПВ.

За допомогою продукту мікробного синтезу *B. subtilis B-7025* (БМ70) та білкових екстрактів пухлин (РЕ), які зазнали впливу гіпертермії та без неї, а також екстракту з курячих ембріонів (КЕП) нами було сконструйовано ряд вакцин. Важливим завданням було проаналізувати можливі зміни, які виникають під дією бактеріального метаболіту в білковому профілі екстрактів, та зміни рівня БТШ. Встановлено, що БМ70 не чинить негативного впливу на структурність та функціональну активність білків ПК і не призводить до істотного зменшення кількості БТШ-70 у всіх проаналізованих екстрактах (рис. 2).

При порівнянні протипухлинної активності сконструйованих ПВ встановлено, що вакцина на основі пухлинної тканини після гіпертермії та вакцина на основі КЕП має більш виражений протипухлинний ефект порівняно з вакциною, виготовленою на основі екстракту РЕ (без гіпертермії), що виявлялося в затримці розвитку первинної пухлини. Вживаність тварин, яким проводили вакцинацію, становила 90% (вакцина на основі ПК після гіпертермії) та 60% (вакцина на основі КЕП), що значно перевищує показники контролю, де вживаність становила всього 20%.

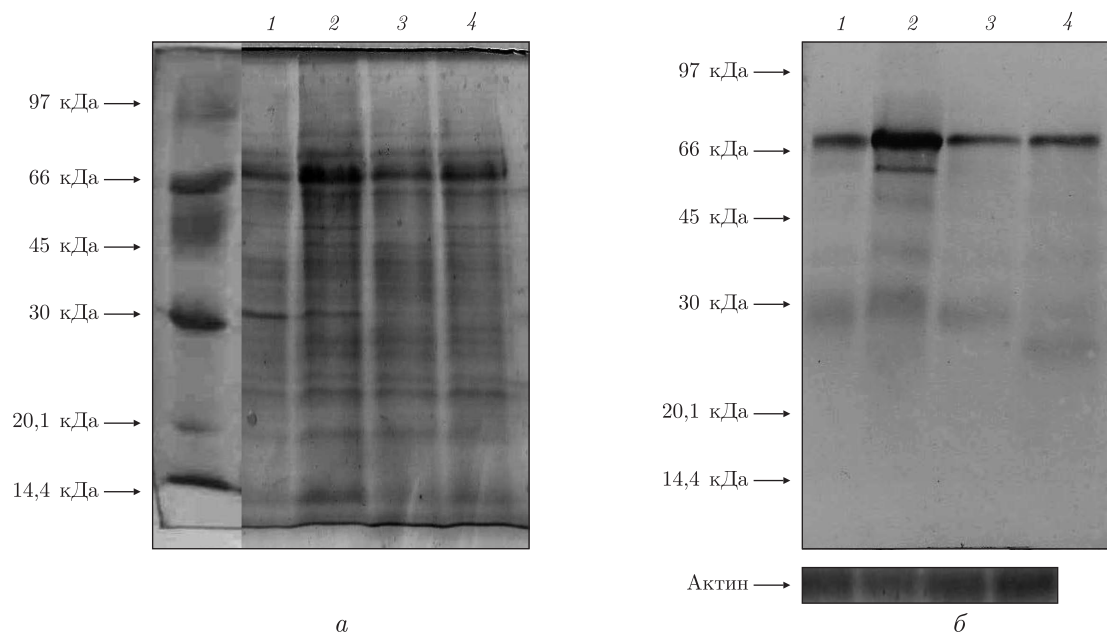


Рис. 2. Електрофореграми (а) та імуноблот-тест (б) змін білкового профілю екстрактів тканини РЕ під дією продукту мікробного синтезу *B. subtilis B-7025*: 1, 2 — до та після гіпертермії; 3, 4 — до та після гіпертермії з додаванням БМ70 *B. subtilis B-7025*

В рамках даного дослідження ми вважали доцільним визначити рівень БТШ-70 у зразках сироватки крові та пухлинної тканини тварин, які отримували різні варіанти вакцин. Досліджувані матеріали відбирали по закінченні експерименту (24-та доба після перещеплення пухлини). Встановлено, що у вакцинованих мишей, в яких зареєстровано виражений протипухлинний ефект, БТШ-70 в сироватці крові був практично відсутнім. На підставі цього можна зробити попереднє припущення, що рівень БТШ-70 в сироватці крові може зменшуватися при ефективній протипухлинній терапії. Також в ЕДТА-екстрактах пухлинних тканин, отриманих від тварин, яким проводили вакцинотерапію, спостерігалось значне зниження рівня БТШ-70 порівняно з його рівнем у мишей контрольної групи, що може слугувати маркером ефективності застосування протипухлинної терапії.

Переконавшись у перспективності застосування вакцин, створених за допомогою БТШ-пептидних комплексів, отриманих із ксеногенного та аутологічного матеріалу, ми вважали доцільним сконструювати та перевірити протипухлинну ефективність вакцини, створеної шляхом одночасного комбінованого використання БТШ-пептидних комплексів різного генезу. Тому наступний етап роботи складався з отримання очищених БТШ-пептидних комплексів з пухлинної тканини (КЛЛ) та екстракту курячих ембріонів. Для оцінки ступеня очищення білкових фракцій, збагачених комплексами “БТШ-пептид”, що є основним показником якості продукту, використовували методи електрофоретичного розділення та імуноблот-тесту (рис. 3).

Протипухлинну ефективність вакцин, виготовлених за допомогою очищених БТШ-пептидних комплексів з пухлинної та ембріональної тканин та БМ70 *B. subtilis B-7025* як ад’юванту, оцінювали на моделі КЛЛ (рис. 4). Терапію починали на другу добу після перещеплення КЛЛ та проводили за стандартною схемою. Мишей було поділено на групи, що отримували як чисті БТШ-пептидні комплекси, одержані з екстракту КЕП або клітин

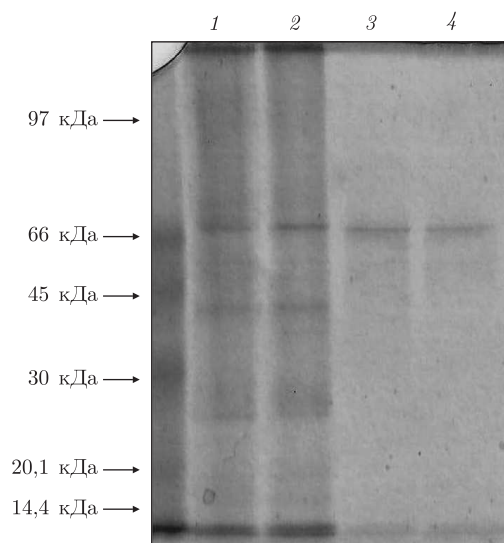


Рис. 3. Електрофореграма білкових екстрактів КЛЛ та екстракту курячих ембріонів до та після очищення: 1 – екстракт КЕП; 2 – екстракт КЛЛ після гіпертермії; 3 – екстракт КЕП після очищення; 4 – екстракт КЛЛ після очищення

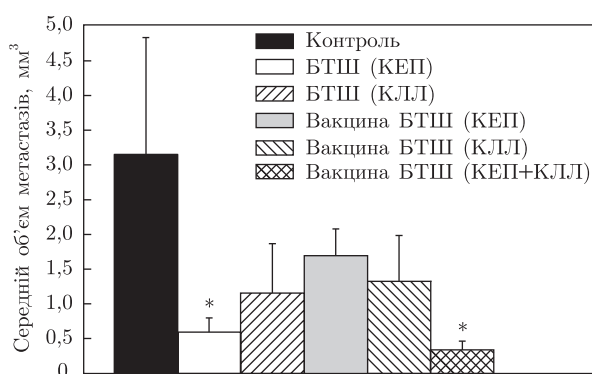


Рис. 4. Об'єм метастазів у тварин з перещепленою карциномою легені Льюїс (на 27-му добу), які одержували БТШ з аутологічної пухлинної тканини (КЛЛ) і ксеногенної ембріональної тканини (КЕП) або вакцини, виготовлені на їх основі за допомогою бактеріального ад'юванту

КЛЛ, так і вакцини, виготовлені на їх основі. Одна з груп одержувала ПВ, яка одночасно містила БТШ-пептидні комплекси з аутологічної пухлинної та ксеногенної ембріональної тканини.

З'ясувалося, що більш значним терапевтичним ефектом характеризувалася саме вакцина, виготовлена на основі поєднання БТШ-комплексів, отриманих з ембріональної та пухлинної тканин, що менше виявлялося в гальмуванні росту первинного пухлинного вузла, однак антиметастатичний ефект був значно вираженим (див. рис. 4). Частота метастазування КЛЛ у легені після використання зазначеної вакцини зменшувалася до 17,5% ( $p < 0,05$ ). Відповідні показники в контрольній групі становили 100%.

При аналізі даних середньої кількості та об'єму метастазів КЛЛ в легенях було встановлено, що застосування вакцин, виготовлених на основі аутологічних та ксеногенних БТШ-комплексів спричиняло істотне зменшення вказаних показників порівняно з невакци-

нованим контролем. Індекс інгібіції метастазування при застосуванні комбінованої вакцини був найвищим і становив 95,9%.

Таким чином, вакцина, сконструйована на основі аутологічних та ксеногенних БТШ-комплексів та БМ70 *B. subtilis B-7025*, характеризується статистично вірогідним гальмуванням кількості та частоти метастазування КЛЛ.

Згідно з результатами досліджень, білки, отримані з екстракту курячих ембріонів, є гомологічними за активними сайтами до БТШ-70, одержаних з пухлинної тканини після гіпертермічної обробки. При цьому рівень БТШ-70 в ембріональній тканині був значно вищим. Перевірка ефективності ПВ показала, що найбільш ефективною є вакцина, сконструйована на основі поєданого використання БТШ-пептидних комплексів (з ембріональної та пухлинної тканини), до яких додавали БМ70 *B. subtilis B-7025*. Отримані дані свідчать про перспективність подальшого дослідження даного типу вакцин, а саме застосування їх в різних схемах та на різних експериментальних моделях пухлинного росту.

1. Зуева Е. Б., Тунова Т. А., Зурочка В. А., Зурочка А. В. Определение параметров иммунной системы и уровней онкомаркеров у больных с различными синдромами иммунопатологии // Мед. иммунология. – 2011. – **13**, № 4–5. – С. 456–457.
2. Березная Н. М., Чехун В. Ф. Иммунология злокачественного роста. – Киев: Наук. думка, 2005. – 791 с.
3. Marigo I., Dolcetti L., Serafini P. et al. Tumor-induced tolerance and immune suppression by myeloid derived suppressor cells // Immunol. Rev. – 2008. – **222**. – P. 162–179.
4. Dubensky T. W. Jr., Reed S. G. Adjuvants for cancer vaccines // Semin. Immunol. – 2010. – **22**, No 3. – P. 155–161.
5. Шевцов М. А. Иммуномодулирующие свойства рекомбинантного белка теплового шока HSP в терапии опухолей головного мозга: Автореф. дис. ... канд. биол. наук: 03.03.04 / Ин-т цитологии РАН. – Санкт-Петербург, 2013. – 24 с.
6. Шевцов М. А., Хачатрян В. А., Маргулис Б. А. Применение белков теплового шока в клинической онкологии // Соврем. онкология. – 2012. – **14**, № 1. – С. 63–68.
7. Corocleanu M. A possible “universal” cancer vaccine that might cause an immune response against emerging cancer cells that originate from any tissue // Med. Hypotheses. – 2008. – **70**. – P. 381–383.
8. Пат. на корисну модель № 77647(UA). Спосіб одержання протипухлинної вакцини / Г.П. Потєбня, Г.В. Діденко, О.П. Кузьменко, Є.Г. Шпак, Г.С. Лісовенко, Н.Л. Черемшенко, Т.В. Симчич, В.Ф. Чехун. – Опубл. 25.02.2013, Бюл. № 4.
9. Осинский С. П. Гипертермия в клинической онкологии: современное состояние проблемы // Онкология. – 2002. – **4**, № 4. – С. 288–292.
10. Скоупс Р. Методы очистки белков. – Москва: Мир, 1985. – 358 с.
11. Barnard E. A. Hexokinase from yeast // Meth. Enzymol. – 1975. – No 42. – P. 6–20.
12. Діденко Г. В., Кузьменко О. П., Шпак Є. Г., Тавровська І. А., Надірашвілі М. А., Блюм І. О., Потєбня Г. П. Оптимізація методів виділення, електрофоретична характеристика та протипухлинна ефективність цитотоксичних метаболітів із фільтрату культуральної рідини *Bacillus subtilis B-7025* // Доп. НАН України. – 2012. – № 7. – С. 185–190.
13. Болюх І. А., Діденко Г. В., Шпак Є. Г., Кузьменко О. П., Лісовенко Г. С., Потєбня Г. П. Експериментальне обґрунтування застосування білків теплового шоку у вакцинотерапії злоякісних новоутворень // Клін. онкологія. – 2013. – № 2(10). – С. 143–146.

И. А. Болюх, Г. В. Диденко, Е. Г. Шпак, А. П. Кузьменко, Г. С. Лисовенко,  
Г. П. Потебня

### **Роль БТШ-пептидных комплексов в конструировании противоопухолевых вакцин**

*Одним из путей повышения противоопухолевой эффективности аутологичной вакцины является введение в ее состав ксеногенного материала, обогащенного белками теплового шока (БТШ). Доказана антигенная гомология БТШ с молекулярной массой 70 кДа из ксеногенной эмбриональной и аутологичной опухолевой ткани. Исследована противоопухолевая эффективность вакцин, сконструированных с помощью БТШ-пептидных комплексов различного генеза. Данные вакцины по уровню торможения роста опухолевого узла и антиметастатическому эффекту оказались более эффективными, чем вакцины, изготовленные по традиционной технологии.*

I. A. Boliukh, G. V. Didenko, E. G. Shpak, A. P. Kusmenko, G. S. Lisovenko,  
G. P. Potebnya

### **Role of HSP-peptide complexes in the design of antitumor vaccines**

*One of the ways to improve the efficacy of autologous cancer vaccine is adding the xenogenic material enriched with heat shock proteins (HSP) to its formula. This paper describes the antigenic homology HSP with MM 70 kDa from xenogenic embryonal and autologous tumor tissues and the investigation of the antitumor efficacy of vaccines designed on the basis of HSP-peptide complexes of various geneses. These vaccines are found out to be more effective in terms of retardation of the growth of a tumor node and the antimetastatic effect than vaccines produced under the traditional technology.*





УДК 546.3:544.77:577-04

М. М. Борова, А. П. Науменко, Я. В. Пірко, Т. А. Круподьорова,  
А. І. Ємець, академік НАН України Я. Б. Блюм

### Отримання квантових точок CdS з використанням гриба *Pleurotus ostreatus*

*Шляхом біологічного синтезу під час культивування міцелію гриба *Pleurotus ostreatus* з солями CdSO<sub>4</sub> й Na<sub>2</sub>S отримано напівпровідникові наночастинки (квантові точки) CdS. За допомогою спектрального аналізу утворених частинок встановлено, що отримані піки поглинання та випромінювання є типовими для наночастинок CdS. Використовуючи метод просвічувальної електронної мікроскопії, було продемонстровано, що квантові точки CdS утворюють щільні скупчення діаметром 40–70 нм. Розмір окремих наночастинок у межах цих скупчень становить 5–8 нм.*

Біосинтез напівпровідникових наночастинок (квантових точок) на сьогодні є новим перспективним напрямом нанобіотехнології. Вони мають різноманітний спектр застосувань, зокрема їх використовують у біологічних дослідженнях для візуалізації рецепторів у живих клітинах, для детектування токсинів, імунофлуоресцентного мічення білків, протипухлинної терапії, а також в оптоелектроніці як компоненти сонячних батарей, світлодіодів, інфрачервоних фотодетекторів тощо [1].

Відомо [2], що деякі живі організми мають ендогенну здатність до синтезу неорганічних матеріалів. Як приклад, аморфний оксид кремнію отримують за допомогою діатомових водоростей, мінерал магнетит синтезують магнітотактичні бактерії, тому ці організми розглядають як можливі ефективні екологічні нанофабрики. Перспективність біологічного синтезу наноматеріалів полягає в тому, що цей процес не передбачає використання токсичних та дорогих реактивів, а його здійснення не є занадто трудомістким. Крім того, отримані в результаті “зеленого” синтезу наночастинки є безпечними для навколишнього середовища та здоров’я людини [3, 4]. Треба відзначити, що різні наночастинки починають утворюватися тоді, коли мікроорганізми або клітини еукаріотичних організмів захоплюють цільові іони із зовнішнього середовища та перетворюють іони металів на елементарний метал за рахунок активності власних ферментів [3].

Квантові точки сульфїду кадмію привертають значну увагу дослідників саме через свої унікальні електронні та оптичні властивості [2, 3]. У ряді робіт нанокристали CdS було синтезовано з використанням бактеріальних систем та дріжджів при додаванні до біологічного

© М. М. Борова, А. П. Науменко, Я. В. Пірко, Т. А. Круподьорова, А. І. Ємець, Я. Б. Блюм, 2014

матеріалу відповідних солей, зокрема  $\text{CdCl}_2$ ,  $\text{CdSO}_4$  й  $\text{Na}_2\text{S}$  [2, 5–7]. Проте варто зауважити, що альтернативним шляхом для отримання екологічних квантових точок може бути використання грибів. Грибні системи є досить ефективними, оскільки вони мають власні ферменти — сульфатредуктази, які при виділенні в середовище у присутності відповідних солей металів здійснюють відновлення сульфатних груп, що дає змогу синтезувати наночастинки  $\text{CdS}$  позаклітинним шляхом. Також суттєвим є те, що гриби набагато ефективніше щодо бактерій секретують у середовище білки, це сприяє високому виходу наночастинок [8]. Тому мета нашого дослідження полягала в розробці шляхів отримання квантових точок сульфідів кадмію за допомогою базидіального гриба, а саме *Pleurotus ostreatus* (родина *Pleurotaceae*). Вибір цього гриба був обумовлений тим, що він характеризується антибактеріальною та антипухлинною активністю, тому його екстракти є важливою сировиною для виготовлення деяких лікарських препаратів [9].

Для отримання квантових точок сульфідів кадмію міцелій гриба *P. ostreatus* культивували з солями  $\text{CdSO}_4$  й  $\text{Na}_2\text{S}$ . У досліджах було використано базидіальний гриб *P. ostreatus* (Jaccq.) P. Kumm. (штам 551) з колекції культур шапинкових грибів Інституту ботаніки ім. М. Г. Холодного НАН України. Культивування *P. ostreatus* здійснювали в конічних колбах об'ємом 100 й 50 мл глюкозопентонодріжджового середовища (ГПД), до складу якого входили такі компоненти, г/л: глюкоза 25,0; пептон 3,0; дріжджовий екстракт 2,0;  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  1,0;  $\text{K}_2\text{HPO}_4$  1,0;  $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  0,25. Після стерилізації поживного середовища (1 атм, 20 хв) у колби вносили інкулюм — по три диски міцелію 7-добової культури гриба розміром 7 мм, попередньо вирощеного на чашках Петрі з агаризованим ГПД-середовищем. У подальшому міцелій *P. ostreatus* вирощували поверхнево у термостаті при температурі  $(26 \pm 2)^\circ\text{C}$ . На 10 добу стерильно відокремлювали поверхневий міцелій *P. ostreatus* від культуральної рідини та багаторазово промивали його бідистильованою водою (не менше 10 разів по 100 мл), щоб позбутися залишків поживного середовища. Далі до цього міцелію додавали 50 мл бідистилату та культивували при  $26\text{--}28^\circ\text{C}$  впродовж 4 дб.

Для біологічного синтезу квантових точок  $\text{CdS}$  у колби з міцелієм вливали по 2 мл  $0,025$  моль/л розчину  $\text{CdSO}_4$  (Sigma-Aldrich, США, ступінь чистоти  $\geq 99,99\%$ ) та культивували впродовж 10 дб. Після цього до середовища додавали 100 мкл  $0,5$  моль/л розчину  $\text{Na}_2\text{S}$  (Sigma-Aldrich, США, ступінь чистоти  $\geq 98\%$ ). Після 7 дб культивування відбирали 2 мл культуральної рідини та центрифугували в двох окремих пробірках об'ємом 1,5 мл (Епендорф, США) впродовж 10 хв при 8000 об/хв. Обережно збирали надосадову рідину та пропускали її через нітроцелюлозні фільтри Millipore (США) (діаметр пор  $0,22$  мкм) для подальшого аналізу зразків. Як контроль використовували зразки без додавання  $\text{CdSO}_4$ .

Спектри поглинання отриманих зразків вимірювали на спектрофотометрі Specord UV–VIS. Спектри поглинання розчинів записано в стандартних кварцових кюветах товщиною 1 см (діапазон пропускання  $170\text{--}1000$  нм). Похибка запису хвильових чисел становила за паспортом  $20\text{ см}^{-1}$ , але з врахуванням її при цифровій обробці та випадкових факторів реальною є похибка до  $80\text{ см}^{-1}$ . Значення оптичної густини визначали з точністю до 1% довжини оптичної шкали в діапазоні оптичної густини від 0 до 1,4. Спектрограма, що записана самописцем Specord UV–VIS, була просканована комп'ютерним сканером і переведена в рисунок у вигляді jpeg-файлу, який обробляли програмним пакетом GetData, в результаті чого спектр було отримано у числовому вигляді dat-файлу. Отримані числові дані обробляли за допомогою прикладного програмного пакета Origin Pro 8.0.

Спектри люмінесценції квантових точок  $\text{CdS}$  при кімнатній температурі вимірювали на серійному спектрофлуориметрі Cary Eclipse (Varian Inc., Agilent Tech.). Максимальна роз-

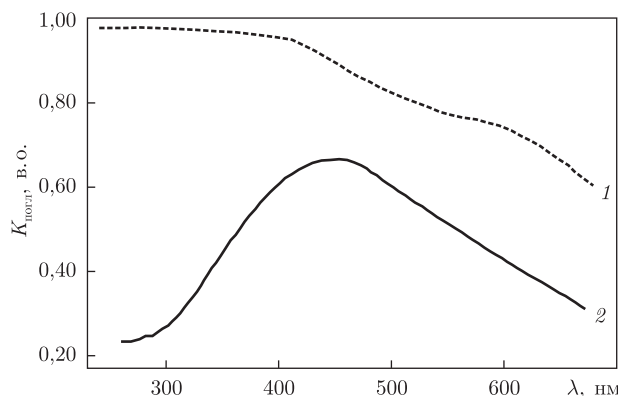


Рис. 1. Спектри поглинання чистої культури гриба *P. ostreatus* (1) та квантових точок CdS (2)

дільна здатність приладу Cary Eclipse — 1,5 нм, що визначається апаратною функцією та найменшою шириною щілини. Обрана спектральна ширина щілини для вимірів становила 5 нм, похибка запису довжини хвилі — 0,05 нм, а похибка визначення інтенсивності не перевищувала 1%. Для врахування спектральної чутливості фотоелектронного помножувача, що використовується у флуориметрі, в програмному забезпеченні приладу передбачена можливість корекції спектрів за рахунок кривої чутливості. Для спектральних вимірювань використовували стандартні кварцові кювети розміром  $1 \times 1 \times 3 \text{ см}^3$ .

Характеристику квантових точок CdS здійснювали за допомогою просвічувальної електронної мікроскопії з використанням електронного мікроскопа JEOL, JEM-2100F (Японія). Прискорююча напруга приладу 200 кВ. Попередньо виконували ультразвукове перемішування зразків, після чого краплини розчинів зразків наносили на мідну сітку з вуглецевим покриттям. Осаджений при випаровуванні матеріал використовували для подальших досліджень. Електронограми зразків, осаджених на мідьвуглецевій сітці, отримували при енергії електронного пучка  $320 \cdot 10^{-16}$  Дж (200 кеВ) (довжина хвилі електронів  $\lambda$  дорівнювала 0,27 нм). Область локалізації пучка на зразку 200 нм. Методом енергороздільної рентгенівської спектроскопії визначали також процентний вміст елементів у полі зору, ширина якого становила 70–150 нм (залежно від ділянки зразка). Реєстрація інтенсивності рентгенівського  $K\alpha_{1,2}$  випромінювання Cd й S здійснювали за допомогою спектрометра JED-2300T.

Типові спектри поглинання квантових точок CdS, утворених в результаті синтезу культурою міцелію гриба *P. ostreatus* (крива 2), та спектри поглинання вихідного розчину зазначеної культури без додавання неорганічних солей  $\text{CdSO}_4$  й  $\text{Na}_2\text{S}$  (крива 1) наведена на рис. 1. Відомо, що спектроскопія оптичного поглинання є ефективним методом як встановлення самого факту наявності наночастинок у досліджуваних зразках, так і оцінки розміру цих частинок [10]. Зокрема, великі кристаліти ( $>10$  нм) характеризуються поглинанням, близьким до монокристалів. Менші наночастинок виявляють блакитний зсув краю поглинання, що відображає варіацію ефективної ширини забороненої зони [11]. Як видно з рисунка, для синтезованих зразків спектр поглинання має вигляд широкої куполоподібної смуги з максимумом  $\lambda_{\text{max}} \sim 453$  нм (для монокристалів ця величина становить  $\sim 515$  нм), що є характерним для нанокристалів CdS з урахуванням “блакитного зсуву”. Те, що смуга є доволі широкою, вказує на певний розкид наночастинок за розмірами. Отримані спектри поглинання добре узгоджуються з даними роботи [2], де максимум поглинання CdS становить 450 нм.

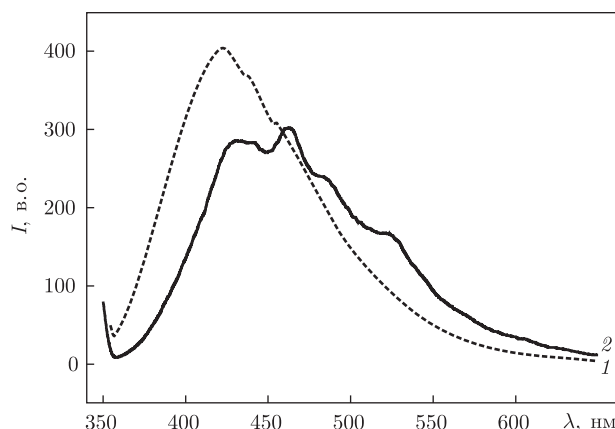


Рис. 2. Спектри фотолюмінесценції чистої культури гриба *P. ostreatus* (1) та квантових точок CdS (2)

Порівняння наших даних з результатами інших авторів також дозволяє припустити, що найбільша частка припадає на наночастинки з розмірами  $\sim 5\text{--}8$  нм [12]. Крім того, що суттєво, вказані спектри поглинання принципово відмінні від спектрів поглинання розчину самої чистої культури *P. ostreatus*. Люмінесценцію наночастинок CdS, отриманих за допомогою різних способів і різних матриць, досліджували автори публікації [12]. Як вже відзначалось, зміна розмірів наночастинок у межах  $2\text{--}10$  нм призводить до зміни ширини забороненої зони від  $4,3$  до  $2,5$  еВ, а отже, й краю поглинання. Такі зміни впливають на форму та параметри спектрів люмінесценції. Зазначено наявність трьох різних смуг люмінесценції: екситонної — “зеленої”, зумовленої дефектами структури наночастинок CdS — “жовтої”, а також з більш глибоких електронних рівнів — “червоної”.

Спектр фотолюмінесценції, що отриманий при збудженні випромінюванням з  $\lambda = 340$  нм для зразків, які містять квантові точки CdS (крива 2), наведений у порівнянні зі спектром фотолюмінесценції розчину чистої культури *P. ostreatus* (крива 1), демонструє рис. 2. Власне свічення культури характеризується широкою куполоподібною смугою, тоді як люмінесценція синтезованого зразка має істотно складніший характер. Зокрема, на широкій смузі спостерігаються кілька чітких максимумів при  $431, 462, 486, 524$  нм, які відповідають екситонним смугам наночастинок різного розміру.

Отримані дані фотолюмінесценції збігаються з результатами роботи [7], в якій для біосинтезу CdS автори використовували кілька бактеріальних систем. Люмінесценція сформованих частинок спостерігалася в межах  $440\text{--}450$  нм при збудженні світлом  $365$  нм та мала кілька максимумів, а саме  $470, 462$  та  $452$  нм при збудженні світлом  $340$  нм. При цьому відзначалося, що зсув до більш коротких значень довжин хвиль був обумовлений зменшенням розмірів наночастинок у зразку. Крім того, в статті [6] автори повідомляють, що утворені ними квантові точки сульфїду кадмію мали люмінесценцію при  $\lambda = 460$  нм, використовуючи дріжджі як матрицю для біосинтезу. Отже, вказані спектри поглинання і фотолюмінесценції свідчать про наявність у досліджених об’єктах наночастинок сульфїду кадмію різного розміру, переважно  $5\text{--}8$  нм, що корелює з результатами зазначених вище робіт.

За допомогою просвічувальної електронної мікроскопії нами було отримано електроннограми зразків, осаджених на мідьвуглецевій сітці. Типову електроннограму ілюструє рис. 3 (вставка). Представлені дифракційні максимуми 1, 2 й 3 відповідають міжплощинним відстаням  $d_1 = 0,334$  нм,  $d_2 = 0,205$  нм,  $d_3 = 0,188$  нм. Згідно з роботою [13], такі міжплощинні

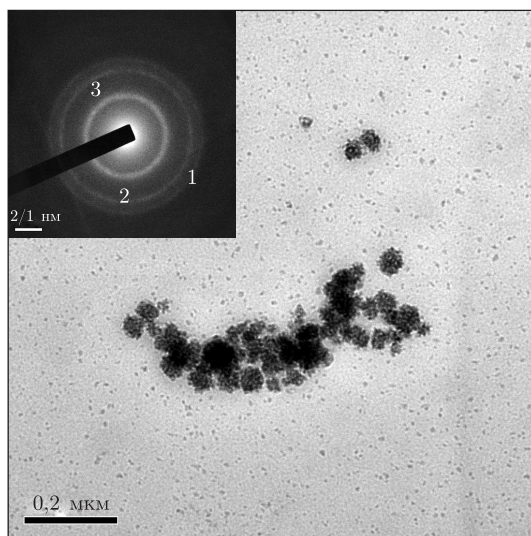


Рис. 3. Електронно-мікроскопічне зображення конгломератів квантових точок CdS, отриманих з використанням *P. ostreatus*.

Вставка: електроннограма зразка *P. ostreatus* + CdS

відстані відповідають сімействам площин (002), (110) й (103) кристалів CdS, модифікація вюрцит.

Результати рентгеноспектрального аналізу свідчать про наявність у зразках елементів Cd й S, вміст яких у полі зору дорівнює 20–30%. Крім того, слід відзначити, що в полі зору були наявні інші елементи, зокрема O (47%), Si (3%), Fe (0,52%), P (3,62%), K (8,79%). Їх наявність обумовлена біологічною діяльністю культури гриба, а також хімічними компонентами, які входять до складу поживного середовища.

Також методом сканувальної просвічувальної електронної мікроскопії високого розділення вдалося встановити, що синтезовані квантові точки сульфїду кадмію утворюють кульові конгломерати діаметром 40–70 нм (див. рис. 3). У межах вказаних скупчень квантові точки CdS мають сферичну форму, однорідну морфологію та діаметр від 5 до 8 нм (рис. 4).

Як вже відзначалося, базидіальний гриб *P. ostreatus* вперше використовується в представленому дослідженні як ємність для біосинтезу напівпровідникових наночастинок. На даний час немає робіт, які б дозволяли порівняти морфологію та розміри квантових точок, утворених саме з базидіальних грибів. Однак подібні дослідження були проведені з використанням інших біосистем. Зокрема, наночастинок CdS успішно отримували за допомогою аскоміцетового гриба *Fusarium oxysporum* [14]. Авторами було доведено, що синтезовані ними наночастинок CdS мають діапазон розмірів 5–20 нм. Крім того, в статті [15] продемонстрована можливість отримання квантових точок CdS модифікації вюрцит сферичної форми з розміром від 2 до 5 нм з використанням *E. coli*. Але в указаних працях наночастинок сульфїду кадмію не утворювали щільних конгломератів, їх виявляли у вигляді чітко помітних окремих частинок. Можливо, утворення скупчень пояснюється поступовим злипанням окремих квантових точок з часом. Важливо відзначити, що авторами статті [14] було встановлено таке: утворення наночастинок CdS є виключно ферментативним процесом, який відбувається за участю специфічних сульфатредуктаз. Ці самі фактори, тобто наявність сульфатредуктаз у гриба *P. ostreatus*, можуть пояснювати отримані нами результати.



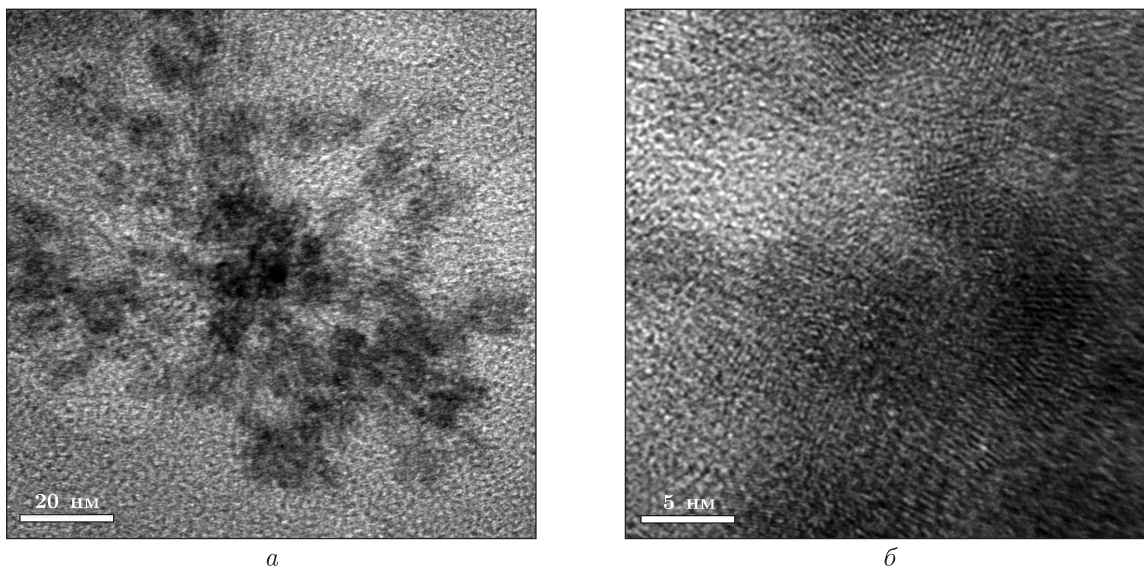


Рис. 4. Електронно-мікроскопічні зображення квантових точок CdS у межах скупчення: *а* — масштабна одиниця 20 нм; *б* — масштабна одиниця 5 нм

Таким чином, у ході проведеного дослідження з біологічного синтезу наночастинок сульфід кадмію встановлено, що базидіальний гриб *P. ostreatus* є ефективною біологічною ємністю для нанотехнологічних перетворень. Результати спектрального аналізу утворених квантових точок засвідчили, що отримані піки поглинання та випромінювання є типовими для наночастинок CdS. За допомогою рентгеноспектрального аналізу вдалося визначити, що процентний вміст елементів Cd й S у полі зору знаходиться в межах від 20 до 30%. За допомогою просвічувальної електронної мікроскопії було продемонстровано, що квантові точки утворюють щільні скупчення діаметром 40–70 нм. Розмір окремих наночастинок в межах цих скупчень становить 5–8 нм. Отримані нами квантові точки CdS будуть використані для подальших досліджень.

1. Rizvi S. B., Ghaderi S., Keshtgar M., Seifalian A. M. Semiconductor quantum dots as fluorescent probes for in vitro and in vivo bio-molecular and cellular imaging // Nano Rev. – 2010. – **1**. – P. 1–15.
2. Mousavi R. A., Akhavan S. A., Fazeli M. R. Biosynthesis, purification and characterization of cadmium sulfide nanoparticles using enterobacteriaceae and their application // Nanomater. Appl. Proper. – 2012. – **1**, No 1. – P. 1–5.
3. Li X., Xu H., Chen Zh.-Sh., Chen G. Biosynthesis of nanoparticles by microorganisms and their applications // J. Nanomater. – 2011. – **2011**. – P. 1–16.
4. Бурлака О. М., Пірко Я. В., Ємець А. І., Блом Я. Б. “Зелений” синтез наночастинок металів: потенціал біологічних систем та перспективи його використання // Наноструктур. матеріалознавство. – 2012. – № 4. – С. 89–104.
5. Cunningham D. P., Lundie L. L. Precipitation of cadmium by *Clostridium thermoaceticum* // Appl. Environ. Microbiol. – 1993. – **59**, No 1. – P. 7–14.
6. Dameron C. T., Reese R. N., Mehra R. K. Biosynthesis of cadmium sulphide quantum semiconductor crystallites // Nature. – 1989. – **338**, No 13. – P. 596–597.
7. El-Shanshoury A. E.-R. R., Elsilk S. E., Ebeid M. E. Rapid biosynthesis of cadmium sulfide (CdS) nanoparticles using culture supernatants of *Escherichia coli* ATCC 8739, *Bacillus subtilis* ATCC 6633 and *Lactobacillus acidophilus* DSMZ 20079T // Afr. J. Biotechnol. – 2012. – **11**, No 31. – P. 7957–7965.
8. Gupta S., Sharma K., Sharma R. Myconanotechnology and application of nanoparticles in biology // Res. Sci. Technol. – 2012. – **4**, No 8. – P. 36–38.

9. Gregori A., Svagelj M., Pohleven J. Cultivation techniques and medicinal properties of *Pleurotus spp* // Food Technol. Biotechnol. – 2007. – **45**, No 3. – P. 238–249.
10. Martínez-Casta nón G. A., Loyola-Rodríguez J. P., Reyes-Macías J. F. Synthesis and optical properties of functionalized CdS nanoparticles with different sizes // Superficies y vacío. – 2010. – **23**, No 4. – P. 1–4.
11. Rossetti R., Ellison J. L., Gibson J. M., Brus L. E. Size effects in the excited electronic states of small colloidal CdS crystallites // J. Chem. Phys. – 1984. – **80**, No 9. – P. 4464–4469.
12. Baset S., Akbari H., Zeynali H., Shafie M. Size measurement of metal and semiconductor nanoparticles via UV-vis absorption spectra // Digest J. Nanomater. Biostruct. – 2011. – **6**, No 2. – P. 709–716.
13. Муркин Л. И. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов. – Москва: Гос. изд-во физ.-мат. лит., 1961. – 863 с.
14. Ahmad A., Mukherjee P., Mandal D. et al. Enzyme-mediated extracellular synthesis of CdS nanoparticles by the fungus, *Fusarium oxysporum* // J. Am. Chem. Soc. – 2002. – **124**. – P. 12108–12109.
15. Sweeney R. Y., Mao C., Gao X. Bacterial biosynthesis of cadmium sulfide nanocrystals // Chem. Biol. – 2004. – **11**, No 11. – P. 1553–1559.

ДУ “Інститут харчової біотехнології та геноміки НАН України”, Київ  
Київський національний університет  
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 23.09.2013

**М. Н. Боровая, А. П. Науменко, Я. В. Пирко, Т. А. Круподерова,  
А. И. Емец, академик НАН Украины Я. В. Блюм**

### **Получение квантовых точек CdS при использовании гриба *Pleurotus ostreatus***

*Путем биологического синтеза во время культивирования мицелия гриба *Pleurotus ostreatus* с солями CdSO<sub>4</sub> и Na<sub>2</sub>S получены полупроводниковые наночастицы (квантовые точки) CdS. С помощью спектрального анализа образованных частиц установлено, что полученные пики поглощения и излучения являются типичными для наночастиц CdS. Используя метод просвечивающей электронной микроскопии, было продемонстрировано, что квантовые точки CdS образуют плотные скопления диаметром 40–70 нм. Размер отдельных наночастиц в пределах этих скоплений составляет 5–8 нм.*

**M. N. Borovaya, A. P. Naumenko, Ya. V. Pirko, T. A. Krupodorova,  
A. I. Yemets, Academician of the NAS of Ukraine Ya. V. Blume**

### **Production of CdS quantum dots with the use of the fungus *Pleurotus ostreatus***

*By the biological synthesis during culturing the mycelium of fungus *Pleurotus ostreatus* with salts CdSO<sub>4</sub> and Na<sub>2</sub>S, CdS semiconductor nanoparticles (quantum dots) are obtained. Using the spectral analysis of formed particles, it is established that the absorption peaks obtained are typical of CdS nanoparticles. By the method of transmission electron microscopy, it is demonstrated that the obtained quantum dots form dense clusters with a diameter from 40 to 70 nm. The size of individual nanoparticles within these clusters is from 5 to 8 nm.*



УДК 616.12-008.318.1

**И. А. Чайковский**, академик НАН Украины **И. Д. Войтович**

### **Подходы к оценке степени зрелости клинических информационных технологий на примере технологий анализа электрической активности сердца**

*Дано определение клинической информационной технологии, предложено понятие “степень зрелости клинической информационной технологии”, разработана последовательность этапов и стадий развития клинических информационных технологий, которая описывает весь цикл их создания. Приведен пример разработанной в Институте кибернетики НАН Украины зрелой информационной технологии.*

Эффективная диагностика болезней сердца остается одной из главных задач клинической медицины. Это обуславливается большой распространенностью и социально-экономической важностью таких заболеваний, прежде всего ишемической болезни сердца (ИБС), которая в последние десятилетия приняла характер пандемии. Особенно высок уровень заболеваемости сердечно-сосудистой системы и смертности в результате нарушений сердечной деятельности в Украине. Если в большинстве стран Европы на 1000 чел. населения приходится не более 3 случаев смерти от сердечно-сосудистой патологии, то в Украине более 9 случаев [1].

Понятно, что потребность в усовершенствовании методов диагностики заболеваний сердца весьма велика. Прежде всего это относится к неинвазивным методам, как наиболее доступным и безопасным. Анализ электрической активности сердца по-прежнему является наиболее распространенным, доступным и дешевым методом объективного обследования сердца. Однако чувствительность и специфичность обычного электрокардиографического обследования недостаточно высоки. Известно, что ЭКГ покоя, оцениваемая по общепринятым критериям, остается нормальной приблизительно у 50% больных с хронической ИБС, в том числе во время эпизодов дискомфорта в грудной клетке [2]. Усовершенствование диагностики возможно только на основе инновационных технологий.

На протяжении многих лет в Институте кибернетики им. В. М. Глушкова НАН Украины разрабатываются ряд современных информационных технологий на основе новых программно-аппаратных комплексов (ПАК), призванных увеличить эффективность анализа электрического генератора сердца. Среди этих комплексов следует отметить магнитокар-



диографические системы, системы ЭКГ 4-го поколения [3]. Помимо этого, разрабатываются и комплексы для оценки гемодинамики и микроциркуляции.

Клиническая кибернетика, как научная дисциплина, является основой создания этих современных средств функциональной диагностики и в особенности имплементации их в практику лечебно-профилактических учреждений.

В этой связи надо заметить, что определение термина “клиническая кибернетика”, как раздела медицинской кибернетики, не является устоявшимся. Поскольку кибернетика — наука об общих законах управления и связи в организованных системах любой природы (машинах, живых организмах и обществе), то, на наш взгляд, адекватным было бы следующее определение: клиническая кибернетика — это научная дисциплина, предметом которой является разработка и применение автоматизированных информационных систем и технологий, поддерживающих принятие всех возможных типов врачебных решений, а именно диагностических, прогностических, тактических (т. е. связанных с тактикой ведения больных в широком понимании этого слова), которые имеют место в клинической медицине.

Таким образом, центральным элементом дисциплины “клиническая кибернетика” являются клинические информационные технологии (ИТ), т. е. совокупность методов и программно-технологических средств, объединенных в технологическую цепочку, обеспечивающую сбор, хранение, предварительную обработку, интерпретацию, вывод и распространение информации. На выходе технологии образуется информационный продукт в форме, отвечающей потребностям конкретной предметной области, и с использованием “словаря” этой предметной области. В ИТ, относящихся к клинической кибернетике, такой продукт — это автоматизированное диагностическое заключение, прогностический вывод или рекомендация по тактике ведения больного, в том числе медикаментозному или немедикаментозному лечению.

Многие клинические ИТ включают и разработку технических средств регистрации и анализа биологической информации в виде ПАК. Такими, например, являются разработанные в ИК НАН Украины ИТ анализа электрического генератора сердца.

Оценка зрелости создаваемых ИТ является важной задачей. Актуальность этой проблемы начали осознавать достаточно давно. Еще в середине 1970-х гг. военные заказчики в США столкнулись с взрывоподобным ростом объема и сложности задач, возлагаемых на программное обеспечение (ПО), который был вызван появлением новейших (по тем временам) средств вычислительной техники. Сроки выполнения проектов постоянно срывались, качество ПО (соответствие ожиданиям заказчика) оставалось на неприемлемо низком уровне. В этой ситуации был сделан вывод, что фундаментальная проблема “хронического кризиса ПО” состоит в неспособности организаций управлять технологическим процессом разработки программного обеспечения [4]. С этого времени в США стали разрабатываться формальные и объективные методы оценки способности организации-разработчика произвести ПО требуемой сложности в установленные сроки и с требуемым уровнем качества. В 1993 г. появляется версия “Модели технологической зрелости организации-разработчика ПО” (CapabilityMaturity Model for Software (SW CMM)). Еще большую известность получил разработанный в середине 1990-х гг. так называемый Нуре cycle [5]. Однако эти и другие известные модели совершенно не учитывают специфику клинических ИТ, особенно тех, которые связаны не только с разработкой ПО, но и технических средств регистрации информации, иными словами ПАК. По нашему мнению, разработка теоретических основ создания клинических ИТ и подходов к оценке степени зрелости таких технологий является составной частью дисциплины “клиническая кибернетика”.

Последовательность шагов (этапов) в рамках “технологической цепочки” современной клинической ИТ представляется нам следующим образом.

Прежде всего следует определить клиническую проблему, для решения которой создается ИТ. Понятно, что затрачивать интеллектуальные и материальные ресурсы для решения тривиальной задачи нецелесообразно. Поэтому ИТ создается для решения “трудных” клинических, прежде всего диагностических задач. Настоящая работа не ставит целью детальное обсуждение вопроса о том, что такое “трудная” диагностическая задача. Предложим здесь лишь неформальное определение такой задачи — это задача, для которой существующие диагностические алгоритмы имеют ограниченную точность, сложны или излишне трудоемки в реализации или слишком дороги. Отсюда вытекает, что следующим шагом в развитии ИТ является прогнозная оценка ее реализуемости (feasibility) и экономических характеристик с точки зрения цена/эффект. Исходя из такой оценки составляется техническое задание для ПАК, в котором описываются требования как к аппаратной, так и к программной части комплекса. Далее следует этап реализации предложенного технического задания. Важно отметить, что в программном обеспечении, как правило, необходимо реализовать не только общепринятые, но и оригинальные показатели (биомаркеры), которые по замыслу их авторов обладают наибольшей информативностью в отношении решаемой задачи.

Следующим этапом развития ИТ является опытная эксплуатация нескольких разработанных экспериментальных образцов в лечебно-профилактических учреждениях в реальном лечебно-диагностическом процессе. Желательно, чтобы использованию опытных образцов в клинических условиях предшествовал этап экспериментов на животных (animal study). Затем наступает этап обратной связи, когда по результатам этой эксплуатации проводится доработка разработанной технологии во всех аспектах, среди которых кроме чисто технических надо отметить структуризацию отображения и вывода информации для того, чтобы добиться наибольшей наглядности и удобства для пользователя. После этого следует этап, который можно назвать “аналитическим”. Он подразумевает осмысление места разработанной технологии в имеющихся диагностических алгоритмах, ее “полезности” с точки зрения решения заявленной задачи, например уменьшения неопределенности при принятии диагностического решения. Также имеет смысл повторно провести анализ технологии с точки зрения соотношения цена/эффект с учетом реальных затрат и достигнутой диагностической точности.

Если на предшествующих этапах поставленные цели достигнуты, наступает этап государственной регистрации медицинских изделий, который состоит из двух последовательных шагов: а) оценка соответствия медицинских изделий в целях государственной регистрации в форме технических испытаний; б) клинические испытания медицинских изделий. Эта работа проводится в строгом соответствии с имеющимися нормативными документами (приказами Министерства здравоохранения, ГОСТ).

Отдельно следует выделить этап формирования официальных методических рекомендаций по применению ИТ. Он знаменует собой принятие медицинским сообществом инновации, которую представляет собой разработанная ИТ.

В Украине, как правило, такие рекомендации утверждаются как Министерством здравоохранения, так и Национальной академией медицинских наук.

Следующим этапом развития клинической ИТ является ее более или менее широкое использование в практике лечебно-профилактических учреждений. Конечно, этот этап также включает элемент обратной связи. Надо отметить, что на этом этапе важнейшей функ-

цией разработчиков является организация процесса обучения врачей-пользователей технологии.

Если разработанная технология используется успешно и достаточно массово, она на следующем этапе может быть включена в национальные стандарты диагностики и лечения тех или иных заболеваний. Например, если речь идет о новых технологиях анализа электрической активности сердца, они могут стать частью стандартов диагностики тех или иных кардиологических заболеваний, прежде всего ИБС.

Наконец, завершающими этапами развития клинической ИТ могут стать международные многоцентровые исследования, опубликование метаанализов по результатам этих исследований, а затем положительная оценка новой ИТ авторитетными профессиональными агентствами оценки технологий здравоохранения (ОТЗ), анализирующими новые клинические технологии и определяющими политику в области клинической медицины, такими как NICE (Великобритания), AHRG (США), CEDIT (Франция) и другими, а также включение разработанной технологии в международные руководства по должной клинической практике (Good Clinical Practice (GCP)).

К сожалению, до настоящего времени в Украине отсутствует национальное агентство ОТЗ, хотя понимание медицинским сообществом необходимости такой институции возрастает [6]. Если такое агентство будет создано, то оценивание им разработанной технологии станет очередным этапом развития ИТ, предшествующим включению технологии в национальные стандарты диагностики и лечения.

Последовательность этапов развития ИТ представлена в табл. 1.

Предлагаемая схема, состоящая на сегодняшний день из 14 последовательных шагов, конечно, не является исчерпывающей и неоспоримой. Однако, на наш взгляд, она удобна тем, что позволяет оценить степень зрелости любой клинической ИТ. При этом считаем целесообразным для принятия управленческих решений сгруппировать все вышеописанные последовательные этапы в четыре группы — стадии развития клинической ИТ. Технологии, прошедшие этапы с первого по третий, должны быть классифицированы как находящиеся на начальной стадии разработки, с четвертого по восьмой — как находящиеся в стадии устойчивого развития, девятый или десятый этап — как зрелые, т. е. пригодные для практического использования, и наконец, технологии, находящиеся на двух заключительных этапах — как находящиеся в стадии завершенности, т. е. имеющие особую ценность.

Клинические ИТ, в особенности технологии анализа электрического генератора сердца, включающие в себя технические системы регистрации информации, по определению носят междисциплинарный характер. Понятно, что роль основной организации-разработчика (в нашем случае — ИК НАН Украины) на всех этапах развития технологии остается центральной. Однако “фокус” усилий главной организации-разработчика на последовательных этапах развития технологии меняется. Иными словами, на разных этапах развития технологии приоритетными становятся разные виды работ. Также на разных стадиях зрелости технологии меняется и содержание сотрудничества с организациями-партнерами (табл. 2).

Примером зрелой клинической технологии, разработанной в ИК НАН Украины, является технология диагностики хронической ИБС с помощью магнитокардиографии. Эта технология обладает всеми чертами зрелой, а именно:

- 1) она решает крайне актуальную и трудную диагностическую задачу;
- 2) разработаны несколько модификаций измерительной системы, в которых реализованы оригинальные технические решения;

- 3) создано комплексное программное обеспечение, включающее оригинальные биомаркеры и тщательно структурированный заключительный отчет по результатам обследования;
- 4) технология успешно эксплуатируется в нескольких ведущих лечебно-профилактических учреждениях Украины;
- 5) проведены эксперименты на животных;
- 6) проведена государственная техническая и медицинская сертификация технологии;
- 7) на государственном уровне приняты методические рекомендации, регламентирующие применение технологии и ее место в существующих диагностических алгоритмах [7, 8];
- 8) созданы предпосылки (в т. ч. включение в государственную программу) для серийного тиражирования технологии.

Указанная технология имеет также признаки перехода в следующую, завершающую стадию согласно нашей классификации: проведены исследования в нескольких странах Западной Европы и Азии, по результатам которых опубликовано значительное количество работ

Таблица 1. Последовательность этапов развития клинической информационной технологии (ИТ)

№ этапа	Содержание этапа
<i>Начальная стадия</i>	
1	Формулирование клинической проблемы
2	Оценка реализуемости задуманной ИТ и предварительного соотношения цена/эффект
3	Формулирование технического задания для создаваемого программно-аппаратного комплекса
<i>Стадия устойчивого развития технологии</i>	
4	Реализация технического задания, создание нескольких опытных образцов программно-аппаратных комплексов
5	Опытная эксплуатация нескольких экспериментальных образцов в лечебно-профилактических учреждениях
6	Доработка разработанной технологии во всех аспектах по результатам опытной эксплуатации
7	Осмысление места разработанной технологии в имеющихся диагностических алгоритмах, ее "полезности" с точки зрения решения заявленной задачи, повторная оценка технологии относительно соотношения цена/эффект с учетом реальных затрат и достигнутой диагностической точности
8	Осуществление официальной (государственной) технической сертификации разработанного программно-аппаратного комплекса
9	Осуществление официальных (государственных) медицинских испытаний разработанного программно-аппаратного комплекса, включение его в государственный реестр изделий медицинской техники
<i>Стадия зрелости технологии</i>	
10	Широкое использование ИТ в практике лечебно-профилактических учреждений
11	Формирование официальных методических рекомендаций по применению клинической ИТ
12	Включение разработанной технологии в официальные стандарты диагностики тех или иных заболеваний
<i>Стадия завершенности технологии</i>	
13	Международные многоцентровые исследования с использованием разработанной технологии, опубликование метаанализов с положительной оценкой по результатам этих исследований
14	Включение разработанной технологии в международные руководства по должной клинической практике (Good Clinical Practice (GCP))

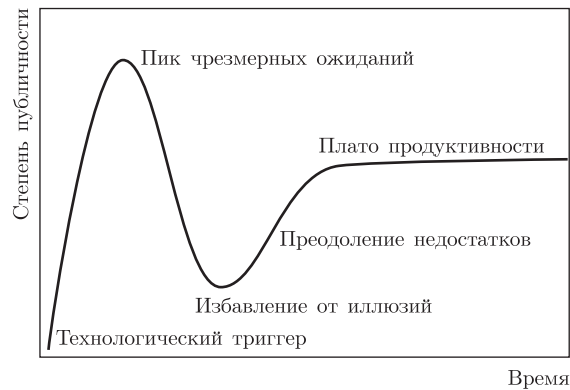


Рис. 1. Цикл зрелости технологии (Hype cycle)

в международных научных журналах, имеются международные систематические обзоры (метаанализы), в которых дается положительная оценка технологии [9].

Как уже упоминалось, существует несколько классификаций степени зрелости технологий. Целесообразно исследовать, как соотносится разработанный нами подход с, например, наиболее известной из таких классификаций — циклом зрелости технологий (Hype cycle). Суть этого цикла такова: каждая технологическая инновация проходит несколько этапов для достижения зрелости, каждый из которых характеризуется различным общественным и профессиональным интересом [5]. Последовательность этапов представлена на рис. 1. На наш взгляд, более точное название для этой последовательности — цикл ожиданий от технологии или цикл признания технологии. Как видно из приведенной схемы, началом этого

Таблица 2. Характеристика “фокуса” усилий и содержания сотрудничества с партнерами главной организации-разработчика на разных стадиях зрелости клинической информационной технологии

Стадия зрелости технологии	“Фокус” усилий организации-разработчика	Организации-партнеры
Начальная	Компетентность и высокая мотивация авторов идеи технологии	
Устойчивого развития	Организация инженерных процессов, координация субподряда, коллегиальное рассмотрение возникших проблем	Поставщики компонентов и/или отдельных блоков аппаратного комплекса; лечебно-профилактические учреждения, в которых осуществляется опытная эксплуатация технологии; органы, уполномоченные осуществлять государственную регистрацию технологии
Зрелости	Повышение качества технологии, подготовка к серийному производству программно-аппаратных комплексов, организация обучения специалистов	Предприятия, проявляющие заинтересованность в серийном тиражировании технологии; лечебно-профилактические учреждения, в которых осуществляется эксплуатация технологии; учреждения додипломного и последипломного медицинского образования
Завершенности	Непрерывное совершенствование всех процессов, анализ опыта использования технологии	Лечебно-профилактические учреждения, в которых осуществляется эксплуатация технологии; международные профессиональные медицинские общества и агентства ОТЗ

цикла является момент более или менее многочисленных публикаций о новой технологии. Возникает вопрос — какой этап разработанной нами классификации считать оптимальным для “запуска” цикла ожиданий. Мы считаем, что это надо делать не ранее чем после завершения седьмого этапа, заключающегося в осмыслении места разработанной технологии в имеющихся диагностических алгоритмах, ее “полезности” с точки зрения решения заявленной задачи, повторном анализе соотношения цена/эффект с учетом реальных затрат и достигнутой диагностической точности (см. табл. 1). В этом случае разрыв между ожиданиями от новой технологии и ее реальными возможностями не будет слишком большим, следовательно, неизбежное разочарование (этап избавления от иллюзий) не будет слишком глубоким, что особенно важно для таких “чувствительных” в социальном смысле технологий, как новые методы диагностики заболеваний сердца.

Наконец, необходимо обсудить особенности функций врача — специалиста по клинической кибернетике. Этот специалист должен сочетать в себе профессиональные знания в области медицинской кибернетики и информатики с владением одной из клинических специальностей, в нашем случае — кардиологии или функциональной диагностики. Исходя из этого его естественная роль — быть инициатором создания клинической ИТ, выступать постановщиком задач на этапе формирования технического задания, предлагать оригинальные биомаркеры и форму представления результатов. Также он является ключевой фигурой на “аналитическом” этапе и этапе формирования методических рекомендаций. Он осуществляет взаимодействие со специалистами лечебно-профилактических учреждений, организацию обучения врачей-пользователей технологии. Иными словами, врач-кибернетик является неотъемлемой составной частью “коллективного конструктора” клинической ИТ, которая всегда имеет междисциплинарную природу.

1. Корнацький В. М. Проблеми здоров'я суспільства та продовження життя. – Київ: Інститут кардіології ім. М. Д. Стражеска, 2006. – 46 с.
2. Connolly D. C., Elveback L. R., Oxman H. A. Coronary heart disease in residents of Rochester, Minnesota: Prognostic value of the resting electrocardiogram at the time of initial diagnosis of angina pectoris // Mayo Clin. Proc. – 1984. – 59. – P. 247–250.
3. Чайковський І. А. Возможности электрокардиографии 4-го поколения в функциональной диагностике наиболее распространенных заболеваний сердца // Кардиология: от науки к практике. – 2012. – № 1. – С. 36–43.
4. Humphrey W. S., Kitson D. H., Gale J. A. Comparison of U.S. and Japanese software process maturity // Proc. of the 13th Intern. Conf. on Software Engineering. – Austin, TX, 1991. – P. 38–49.
5. Fenn J., Raskino M. Mastering the hype cycle: how to choose the right innovation at the right time. – Boston, MA: Harvard Business Press, 2008. – 153 p.
6. Воробьев К. П. Национальные агентства оценки технологий здравоохранения в экономически развитых странах // Укр. мед. часопис. – 2013. – № 3–4. – С. 162–172.
7. Коваленко В. Н., Пархоменко О. Н., Лутай М. І., Сичев О. С., Чайковський І. А. та ін. Магнітокардіографія: Методика проведення обстежень, діагностичні показники, алгоритми клінічного застосування: Метод. рекомендації. – Київ, 2013. – С. 1–54.
8. Чайковський І. А., Бойчак М. П., Мясников Г. В., Сосницька Т. В. Магнітокардіографія в практиці військової медицини: Метод. рекомендації. – Київ, 2010. – С. 1–53.
9. Agarwal R., Saini A., Alyousef T., Umscheid C. A. Magnetocardiography for the diagnosis of coronary artery disease – a systematic review and meta-analysis // Ann. Noninvasive Electrocardiol. – 2012. – 17, No 4. – P. 291–298.

**І. А. Чайковський**, академік НАН України **І. Д. Войтович**

**Підходи до оцінки ступеня зрілості клінічних інформаційних технологій на прикладі технологій аналізу електричної активності серця**

*Дано визначення клінічної інформаційної технології, запропоновано поняття “ступінь зрілості клінічної інформаційної технології”, розроблено послідовність етапів і стадій розвитку клінічних інформаційних технологій, яка описує весь цикл їх створення. Наведено приклад розробленої в Інституті кібернетики НАН України зрілої інформаційної технології.*

**I. A. Chaikovsky**, Academician of the NAS of Ukraine **I. D. Wojtowich**

**Approaches to the evaluation of the maturity degree of clinical information technologies by the example of technologies of analysis of the electrical activity of heart**

*The definition of clinical information technology is formulated, and the concept of “degree of maturity of clinical information technology” is proposed. The sequence of steps and stages of the development of clinical information technologies, which describes their entire living cycle, is designed. The example of a mature information technology developed in the IC of the NAS of Ukraine is described.*

## 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<sub>Е</sub>X2<sub>ε</sub>** 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](mailto:innovation@nas.gov.ua); тел./факс: +38(044)239-64-57).