



ОПОВІДІ
НАЦІОНАЛЬНОЇ
АКАДЕМІЇ НАУК
УКРАЇНИ

3 • 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. Шестопалов, 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 13.03.2014. Формат 84×108/16. Ум. друк. арк. 17,64. Обл.-вид. арк. 16.
Тираж 207 прим. Зам. 3849. Ціна 30 грн.

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

Зміст

Математика

| | |
|---|----|
| <i>Бойко В. М.</i> Редукція диференціальних рівнянь до алгебраїчних | 7 |
| <i>Ковтонюк Д. А., Петков І. В., Рязанов В. І.</i> О регулярных решениях задачи Дирихле для уравнений Бельтрами | 13 |
| <i>Королюк Д. В.</i> Диффузионная аппроксимация статистических экспериментов с настойчивой линейной регрессией и эквilibriumом | 18 |
| <i>Линчук Ю. С.</i> Про один клас діагональних операторів у просторах аналітичних функцій та його застосування | 25 |
| <i>Лебідь В. О., Нижник Л. П.</i> Спектральний аналіз локально скінченних графів з одним нескінченним променем | 29 |
| <i>Kurta V. V.</i> Liouville comparison principle for solutions to semilinear parabolic second-order partial differential inequalities in the whole space | 36 |

Інформатика та кібернетика

| | |
|---|----|
| <i>Сергієнко І. В., Литвин О. М., Лобанова Л. С., Залужна Г. В.</i> Аналіз обчислювальних можливостей інтерлінаційного методу скінченних елементів розв'язання нестационарної задачі теплопровідності | 43 |
| <i>Шевченко А. І., Миненко А. С., Гололобова А. С.</i> Моделирование сложных теплофизических систем с применением нечеткой логики | 51 |
| <i>Ustimenko V. A.</i> On walks of variable length in the Schubert incidence systems and multivariate flow ciphers | 55 |

Механіка

| | |
|---|----|
| <i>Крупенин В. Л., Мягкохлеб К. Б.</i> Об одном классе авторезонансных машин виброударного действия | 64 |
| <i>Ободан Н. И., Прокопало Е. Ф., Громов В. А.</i> Устойчивость и закритическое поведение двухслойных цилиндрических оболочек с частичным “неприклеем” при осевом сжатии .. | 70 |

Фізика

| | |
|--|----|
| <i>Мриглод О. І., Кенна Р., Головач Ю. В., Берш Б.</i> Про порівняння екстенсивної та інтенсивної мір ефективності наукових груп | 75 |
| <i>Прохоров Э. Д., Боцула О. В., Реуткина О. А.</i> Эффективность генерации планарных диодов $n^+ - p - n^+$ с туннельными границами | 82 |

Матеріалознавство

| | |
|--|----|
| <i>Курочкин В. Д.</i> Математичне моделювання процесу утворення шаруватих конденсатів при електронно-променевому випаровуванні-конденсації бінарних систем типу Cu–Cr .. | 90 |
|--|----|

Науки про Землю

| | |
|---|-----|
| <i>Вишневський О. А.</i> Про першу знахідку зонального піропу в осадовому чохлі Українського щита | 98 |
| <i>Костинский А. С.</i> Эволюция диссипативной структуры как модель процесса в очаге землетрясения: аналогии в живых системах и химической кинетике | 104 |

| | |
|---|-----|
| <i>Орлюк М. И., Роменец А. А., Орлюк И. М.</i> Низкочастотный техногенный магнитный шум в г. Киев | 110 |
| <i>Станкевич С. А., Титаренко О. В.</i> Виділення осей синфазності на сейсмограмах за допомогою одновимірного перетворення Радона | 115 |

Хімія

| | |
|---|-----|
| <i>Коновалова В. В., Горобець С. В., Полоз Є. А., Бурбан А. Ф.</i> Магнітно-активні ультрафільтраційні мембрани на основі целюлози | 119 |
| <i>Кублановский В. С., Никитенко В. Н., Руденко К. П.</i> Энергия реорганизации при разряде гидроксипилиминодиацетатных комплексов палладия (II) | 126 |
| <i>Тітов Ю. О., Білявіна Н. М., Марків В. Я., Слободяник М. С., Чумак В. В.</i> Особливості будови п'ятишарової структури ізоморфнозаміщених фаз типу $\text{CaLn}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ | 133 |

Біологія

| | |
|---|-----|
| <i>Адамчук-Чала Н. І., Яценко В. О., Іутинська Г. О.</i> Вплив інокуляції <i>Bradyrhizobium japonicum</i> УКМ В-6035 на фотосинтетичний апарат сої | 140 |
| <i>Куликова А. Д., Андреевко Т. И., Солдатов А. А.</i> Цветовой полиморфизм раковины и активность аминотрансфераз тканей <i>Mytilus galloprovincialis</i> Lam. | 147 |
| <i>Проценко І. О., Говорун Д. М.</i> Конформаційні властивості молекули кверцетину: квантово-хімічне дослідження | 153 |

Біохімія

| | |
|--|-----|
| <i>Секан А. С., Ісаєнков С. В.</i> Одноетапне отримання трансформантів <i>Arabidopsis thaliana</i> , вільних від маркерних послідовностей, за допомогою сайт-специфічної рекомбінаційної системи Cre/loxP під контролем мінімального 35S промотору | 158 |
|--|-----|

Медицина

| | |
|--|-----|
| <i>Завальська Т. В.</i> Вплив антиагрегантної терапії на імунологічний статус у хворих на уперше виниклу стенокардію | 164 |
|--|-----|

Contents

Mathematics

| | |
|---|----|
| <i>Boyko V. M.</i> Reduction of differential equations to algebraic ones | 7 |
| <i>Kovtonyuk D. A., Petkov I. V., Ryazanov V. I.</i> On the regular solutions of the Dirichlet problem for Beltrami equations | 13 |
| <i>Koroliouk D. V.</i> Diffusion approximation of statistical experiments with persistent linear regression and equilibrium | 18 |
| <i>Linchuk Yu. S.</i> On a class of diagonal operators in the spaces of analytic functions and its application | 25 |
| <i>Lebid V. O., Nizhnik L. P.</i> Spectral analysis of locally finite graphs with one infinite ray | 29 |
| <i>Kurta V. V.</i> A Liouville comparison principle for solutions to semilinear parabolic second-order partial differential inequalities in the whole space | 36 |

Information Science and Cybernetics

| | |
|--|----|
| <i>Sergienko I. V., Lytvyn O. M., Lobanova L. S., Zaluzhna G. V.</i> Analysis of the computing power of the interlineation finite-element method of solution of the non-stationary heat conduction problem | 43 |
| <i>Shevchenko A. I., Minenko A. S., Golobova A. S.</i> Simulation of complex thermal physical systems with the use of a fuzzy logic | 51 |
| <i>Ustimenko V. A.</i> On walks of variable length in the Schubert incidence systems and multivariate flow ciphers | 55 |

Mechanics

| | |
|---|----|
| <i>Krupenin V. L., Myagkohlub K. B.</i> On a class of autoresonant machines of vibro-impact action | 64 |
| <i>Obodan N. I., Prokopalo E. F., Gromov V. A.</i> Stability and postcritical behavior of two-layer cylindrical shells with non-adherence area subjected to axial compression | 70 |

Physics

| | |
|--|----|
| <i>Mryglod O. I., Kenna R., Holovatch Yu. V., Berche B.</i> On the comparison of extensive and intensive measures of the efficiency of scientific groups | 75 |
| <i>Prokhorov E. D., Botsula O. V., Reutina O. A.</i> Efficient generation of planar diodes $n^+ - n - n^+$ with tunnel boundaries | 82 |

Materials science

| | |
|--|----|
| <i>Kurochkin V. D.</i> Simulation of the process of formation of layered condensates at EB-PVD of binary systems of Cu–Cr type | 90 |
|--|----|

Geosciences

| | |
|---|-----|
| <i>Vyshnevskiy O. A.</i> On the first finding of zoned pyrope in the sedimentary cover of the Ukrainian shield | 98 |
| <i>Kostinsky A. S.</i> Evolution of a dissipative structure as a model of the process in an earthquake focus: analogies in living systems and chemical kinetics | 104 |
| <i>Orlyuk M. I., Romanets A. A., Orliuk I. M.</i> Technical low-frequency magnetic noise in Kiev . | 110 |

| | |
|--|-----|
| <i>Stankevich S. A., Titarenko O. V.</i> Separation of the coherence axes on seismograms using the one-dimensional Radon transform | 115 |
|--|-----|

Chemistry

| | |
|---|-----|
| <i>Konovalova V. V., Gorobets S. V., Poloz E. A., Burbán A. F.</i> Magnetically active ultrafiltration membranes based on cellulose | 119 |
| <i>Kublanovsky V. S., Nikitenko V. N., Rudenko K. P.</i> Reorganization energy in the discharge of palladium (II) hydroxyethyliminodiacetate complexes | 126 |
| <i>Titov Y. A., Belyavina N. M., Markiv V. Ya., Slobodyanik M. S., Chumak V. V.</i> Constitution peculiarities of the five-layer structure of isomorphically substituted phases of $\text{CaLn}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ type | 133 |

Biology

| | |
|---|-----|
| <i>Adamchuk-Chala N. I., Yacenko V. A., Iutynska G. O.</i> Influence of <i>Bradyrhizobium japonicum</i> UKM B-6035 inoculation on the soybean photosynthetic apparatus | 140 |
| <i>Kulikova A. D., Andreenko T. I., Soldatov A. A.</i> Color polymorphism of a shell and the aminotransferase activity in <i>Mytilus galloprovincialis</i> Lam. tissues | 147 |
| <i>Protsenko I. O., Hovorun D. M.</i> Conformational properties of quercetin: quantum chemistry investigation | 153 |

Biochemistry

| | |
|--|-----|
| <i>Sekan A. S., Isaenkov S. V.</i> One-step transformation with site-specific recombinase Cre/loxP system under the control of minimal 35S promoter for the development of marker-free transgenic <i>Arabidopsis thaliana</i> plants | 158 |
|--|-----|

Medicine

| | |
|--|-----|
| <i>Zavalskaya T. V.</i> Antiplatelet therapy impact on immunological status in patients with recent onset of angina pectoris | 164 |
|--|-----|



УДК 517.95

В. М. Бойко

Редукція диференціальних рівнянь до алгебраїчних

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

У термінах сингулярних модулів редукції, тобто сингулярних модулів неklasичної (умовної) симетрії, вивчено питання редукції диференціальних рівнянь до алгебраїчних рівнянь.

“Некласичний” підхід до знаходження розв’язків диференціальних рівнянь запропоновано в [1] на прикладі (1+1)-вимірному лінійному рівнянні теплопровідності як узагальнення класичного ліївського методу редукції. Протягом останніх десятиліть цей підхід суттєво розвинуто і використано при дослідженні багатьох диференціальних рівнянь з частинними похідними (див. детальний огляд у роботах [2–4]). Слід відмітити, що для відповідних об’єктів у літературі використовують досить різноманітну термінологію: порушені [5], некласичні [6], Q -умовні [7], умовні [8], часткові [9] симетрії, або інволютивні сім’ї/модулі некласичних/умовних операторів симетрії [10, 11] у більш повній формі. Характерною особливістю, яку некласичні симетрії успадковують від ліївських, є те, що вони дозволяють будувати анзаци для невідомої функції, які редукують відповідне диференціальне рівняння до диференціальних рівнянь з меншою кількістю незалежних змінних. Як правило, у літературі розглядають редукції з використанням некласичних симетрій до звичайних диференціальних рівнянь, і на сьогодні існує лише декілька робіт, де розглянуто особливий випадок редукцій до алгебраїчних рівнянь (див., наприклад, [12]). Саме редукціям диференціальних рівнянь до алгебраїчних і присвячено цю роботу.

Нехай задано розшарований простір n незалежних змінних $x = (x_1, \dots, x_n)$ і однієї залежної змінної u . Розглянемо скінченновимірний інволютивний модуль Q векторних полів у цьому просторі і припустимо, що розмірність p модуля Q над кільцем гладких функцій змінних x, u не перевищує n , $0 < p \leq n$. Додатково вважаємо, що модуль Q задовольняє так звану умову на ранг, тобто для кожного фіксованого значення (x, u) проєкція на простір змінних $x \in p$ -вимірною. Атрибут “інволютивний” означає, що комутатор будь-яких двох векторних полів з Q належить Q . Надалі вважаємо, що індекси i та j змінюються від 1

до n , індекс s змінюється від 1 до p , і за індексами, що повторюються, йде підсумовування. Дужками $\langle \dots \rangle$ позначатимемо лінійну оболонку векторних полів над кільцем гладких функцій змінних x, u . Нижні індекси функцій означають диференціювання за відповідними змінними, $\partial_i = \partial/\partial x_i$ і $\partial_u = \partial/\partial u$. Будь-яку функцію вважаємо своєю похідною нульового порядку. Весь розгляд проводимо у рамках локального підходу.

Нехай векторні поля $Q_s = \xi^{si}(x, u)\partial_i + \eta^s(x, u)\partial_u$ утворюють базис модуля Q , тобто $Q = \langle Q_1, \dots, Q_p \rangle$. Тоді умова на ранг еквівалентна рівності $\text{rang}(\xi^{si}) = p$. Вимога, що комутатор будь-якої пари базисних елементів належить Q , тобто $[Q_s, Q_{s'}] \in Q$, достатня для інволютивності модуля Q . Якщо векторні поля $\tilde{Q}_1, \dots, \tilde{Q}_p$ утворюють інший базис модуля Q , то існує невідроджена $p \times p$ матрична функція $(\lambda^{ss'}(x, u))$ така, що $\tilde{Q}_s = \lambda^{ss'} Q_{s'}$.

Розглянемо диференціальне рівняння \mathcal{L} вигляду $L(x, u_r) = 0$ для невідомої функції u незалежних змінних $x = (x_1, \dots, x_n)$ і порядку r . Тут через u_r позначено множину всіх похідних функції u за змінними x порядку не вище r , включаючи u як похідну нульового порядку. У рамках локального підходу рівняння \mathcal{L} інтерпретують як алгебраїчне рівняння в просторі струменів $J^r = J^r(x|u)$ порядку r і ототожнюють з многовидом його розв'язків у J^r :

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

Символ \mathcal{L} використовуємо також для позначення цього многовиду, а символ \mathcal{Q}_r — для позначення многовиду, який визначено всіма диференціальними наслідками характеристичної системи $Q[u] = 0$ в J^r .

Диференціальне рівняння \mathcal{L} називають *умовно інваріантним* відносно інволютивного модуля Q , якщо співвідношення $V_r L(x, u_r)|_{\mathcal{L} \cap \mathcal{Q}_r} = 0$ виконується для будь-якого $V \in Q$. Це співвідношення називають *критерієм умовної інваріантності*, а Q — *інволютивним модулем операторів умовної симетрії* (або Q -умовної симетрії, або неklasичної симетрії і т. п.) рівняння \mathcal{L} .

Рівняння \mathcal{L} умовно інваріантне відносно модуля Q тоді і лише тоді, коли анзац, побудований за цим модулем, редукує рівняння \mathcal{L} до диференціального рівняння з $n-p$ незалежними змінними. Тому інволютивні модулі операторів умовної симетрії коротко називатимемо *модулями редукції* рівняння \mathcal{L} [2, 4].

Нехай $L = L[u]$ — диференціальна функція порядку $\text{ord } L = r$ (тобто гладка функція незалежних змінних $x = (x_1, \dots, x_n)$ і похідних від u за змінними x порядку не вище r) і нехай Q — p -вимірний ($0 < p < n$) інволютивний модуль, який породжений векторними полями $Q_s = \xi^{si}(x, u)\partial_i + \eta^s(x, u)\partial_u$ і задовольняє умову на ранг $\text{rang}(\xi^{si}) = p$. Модуль Q називатимемо *сингулярним* для L , якщо існує диференціальна функція $\tilde{L} = \tilde{L}[u]$ порядку меншого, ніж r , така, що $L|_{\mathcal{Q}_r} = \tilde{L}|_{\mathcal{Q}_r}$. В іншому випадку Q є *регулярним* модулем для диференціальної функції L . Якщо мінімальний порядок диференціальних функцій, обмеження яких на \mathcal{Q}_r збігається з $L|_{\mathcal{Q}_r}$, дорівнює k ($k < r$), тоді модуль Q називатимемо *сингулярним копорядку k* для диференціальної функції L . Модуль Q є *ультрасингулярним* для L , якщо $L|_{\mathcal{Q}_r} \equiv 0$. Копорядок сингулярності ультрасингулярних модулів та порядок тотожно нульових диференціальних функцій зручно покласти рівним -1 . Для будь-якого регулярного модуля диференціальної функції L визначимо його копорядок сингулярності як $r = \text{ord } L$. Копорядок сингулярності модуля Q відносно диференціальної функції L позначимо через $\text{sc } Q$. Інволютивний модуль Q , що задовольняє умову на ранг, є (*сильно*) *сингулярним* для диференціального рівняння \mathcal{L} , якщо він сингулярний для диференціальної функції $L[u]$,

яка є лівою частиною канонічного зображення $L[u] = 0$ рівняння \mathcal{L} . Атрибут “сильний”, як правило, будемо опускати.

Випадок, коли розмірність модулів векторних полів збігається з кількістю незалежних змінних, тобто $p = n$, є особливим для сингулярності модулів диференціальних функцій. Якщо n -вимірний інволютивний модуль Q породжують векторні поля, що задовольняють умову на ранг, то для будь-якої диференціальної функції $L = L[u]$ порядку r існує диференціальна функція $\tilde{L} = \tilde{L}[u]$ нульового порядку така, що $L|_{Q_r} = \tilde{L}|_{Q_r}$. Тому в цьому випадку вважаємо, що модуль Q є сингулярним для L тоді і лише тоді, коли він є ультра-сингулярним для L , тобто $L|_{Q_r} \equiv 0$. Цей випадок також є особливим при редукції диференціальних рівнянь. На відміну від модулів редукції нижчих розмірностей, n -вимірні модулі редукції будь-якого диференціального рівняння \mathcal{L} з n незалежними змінними редукують це рівняння до алгебраїчних рівнянь, а не до диференціальних рівнянь з меншою кількістю незалежних змінних. Більш того, лише в цьому випадку регулярні та сингулярні модулі редукції можна вивчити в рамках єдиного підходу.

Нехай Q — інволютивний модуль розмірності $p = n$, який задовольняє умову на ранг. Тоді можна вибрати базис модуля Q , утворений векторними полями $Q_s = \partial_s + \eta^s(x, u)\partial_u$. Оскільки модуль Q інволютивний, базисні елементи Q_s комутують, а тому коефіцієнти $\eta^s = \eta^s(x, u)$ задовольняють систему рівнянь

$$\eta_{s'}^s + \eta^{s'} \eta_u^s = \eta_s^{s'} + \eta^s \eta_u^{s'}. \quad (1)$$

За теоремою Фробеніуса система $Q_s \Phi = \Phi_s + \eta^s \Phi_u = 0$ на функцію $\Phi = \Phi(x, u)$ має єдиний функціонально незалежний розв'язок, що не є сталою. Іншими словами, коефіцієнти η^s можна зобразити у вигляді $\eta^s = -\Phi_s/\Phi_u$, де $\Phi = \Phi(x, u)$ — деяка гладка функція, $\Phi_u \neq 0$. Неявний анзац, побудований для u за модулем Q , має вигляд $\Phi(x, u) = \varphi$, де φ — нова невідома (нуль-арна) функція. Вона є сталою, оскільки розмірність модуля Q дорівнює кількості незалежних змінних x .

Припустимо, що Q — модуль редукції диференціального рівняння $\mathcal{L}: L[u] = 0$ порядку r . Усі похідні функції u за змінними x від 1-го до r -го порядку на многовиді Q_r , виражаються через змінні x і u :

$$u_\alpha = h^\alpha(x, u) := (\partial_1 + \eta^1 \partial_u)^{\alpha_1} \cdots (\partial_n + \eta^n \partial_u)^{\alpha_n} u, \quad 1 \leq |\alpha| \leq r.$$

Оскільки векторні поля Q_s комутують, таке зображення для похідних u_α добре визначене, бо не залежить від порядку множників у правій частині. Використовуючи це зображення для виключення похідних u_α з L , отримаємо диференціальну функцію $\tilde{L} = \tilde{L}[u]$ нульового порядку, тобто функцію від змінних x, u . Варіюючи η^s , отриману функцію можна інтерпретувати як диференціальну функцію незалежних змінних x, u та залежних змінних η^s . Таким чином, внаслідок [4, лема 1] Q є модулем редукції для \mathcal{L} , якщо виконується умова $Q_s \tilde{L}|_{\tilde{L}=0} = 0$. Ця умова разом з рівняннями (1) задає повну систему визначальних рівнянь для коефіцієнтів η^s , а на підставі зображення $\eta^s = -\Phi_s/\Phi_u$ її можна також інтерпретувати як рівняння $L^\Phi = 0$ на функцію Φ , де $L^\Phi = \tilde{L}|_{\eta^s = -\Phi_s/\Phi_u}$ розглядаємо як диференціальну функцію незалежних змінних x, u та залежної змінної Φ .

Для спрощення умови $Q_s \tilde{L}|_{\tilde{L}=0} = 0$ можна розв'язати рівняння $\tilde{L} = 0$ відносно однієї зі змінних (відносно однієї з незалежних змінних або відносно залежної змінної u) і виключити цю змінну з рівняння $Q_s \tilde{L} = 0$, використовуючи одержане співвідношення. Оскільки функції \tilde{L} і η^s (відповідно Φ) залежать від тих самих аргументів, ця процедура не приводить до звичайного диференціального рівняння.

У дійсності зручніше використовувати інший шлях, із залученням леми Адамара. У рамках локального підходу достатньо розбити подальший розгляд на два випадки: або функція \tilde{L} має максимальний ранг, або вона є сталою. Згідно з лемою Адамара у першому випадку для кожного s умова $Q_s \tilde{L}|_{\tilde{L}=0} = 0$ еквівалентна рівності $Q_s \tilde{L} = \lambda^s \tilde{L}$ для деякої гладкої функції $\lambda^s = \lambda^s(x, u)$. Після перехресного диференціювання для кожної пари (s, s') отримуємо

$$Q_s Q_{s'} \tilde{L} - Q_{s'} Q_s \tilde{L} = Q_s (\lambda^{s'} \tilde{L}) - Q_{s'} (\lambda^s \tilde{L}) = (Q_s \lambda^{s'} - Q_{s'} \lambda^s) \tilde{L} = 0,$$

тобто $Q_s \lambda^{s'} = Q_{s'} \lambda^s$. Отже, існує гладка функція $\Lambda = \Lambda(x, u)$ така, що $\lambda^s = Q_s \Lambda$. Тоді внаслідок зображення $\eta^s = -\Phi_s/\Phi_u$ із системи рівнянь $Q_s \tilde{L} = \lambda^s \tilde{L}$ випливає, що $L^\Phi = \tilde{\Lambda} \zeta(\Phi)$ для деякої гладкої функції ζ від однієї змінної, де $\tilde{\Lambda} = e^\Lambda$ — ненульова функція змінних x, u .

У другому випадку умова $Q_s \tilde{L} = 0$ виконується для всіх змінних x, u як диференціальний наслідок припущення, що функція \tilde{L} є сталою. Покладаючи $\tilde{\Lambda} = 1$ і $\zeta(\Phi) = L^\Phi = \text{const}$, отримуємо те саме рівняння $L^\Phi = \tilde{\Lambda} \zeta(\Phi)$ з ненульовим множником $\tilde{\Lambda}$.

Насправді це рівняння є в точності умовою редукції рівняння \mathcal{L} за допомогою анзацу $\Phi(x, u) = \varphi$, що асоційований з модулем Q . Дійсно, якщо функцію $u = u(x)$ неявно визначено цим анзацом, похідні від u (ненульового порядку) можна знайти з диференціальних наслідків рівнянь $u_s = -\Phi_s/\Phi_u$. Тому підстановка анзацу в рівняння \mathcal{L} приводить до рівняння $L^\Phi|_{\Phi(x,u)=\varphi} = 0$, яке внаслідок умови редукції еквівалентне алгебраїчному рівнянню $\zeta(\varphi) = 0$ відносно сталої φ .

Очевидно, що модуль Q є ультрасингулярним для рівняння \mathcal{L} тоді і лише тоді, коли функція ζ тотожно рівна нулю.

Підсумовуючи вищенаведений розгляд, приходимо до такого твердження.

Твердження. Модуль Q є n -вимірним модулем редукції диференціального рівняння \mathcal{L} : $L[u] = 0$ відносно невідомої функції u від n незалежних змінних x тоді і лише тоді, коли цей модуль породжений векторними полями $\partial_s - (\Phi_s/\Phi_u)\partial_u$, $s = 1, \dots, n$, де функція $\Phi = \Phi(x, u)$ задовольняє рівняння $L^\Phi = \tilde{\Lambda} \zeta(\Phi)$, у якому $\tilde{\Lambda}$ — ненульова функція змінних x, u , а диференціальну функцію $L^\Phi = L^\Phi[\Phi]$ отримано з $L[u]$ виключенням похідних від u , використовуючи диференціальні наслідки рівнянь $u_s = -\Phi_s/\Phi_u$. При цьому анзац $\Phi(x, u) = \varphi$ редукує рівняння \mathcal{L} до алгебраїчного рівняння $\zeta(\varphi) = 0$ відносно сталої φ .

Більш того, справедлива така теорема.

Теорема. З точністю до еквівалентності сімей розв'язків, для будь-якого диференціального рівняння \mathcal{L} однієї невідомої функції від n незалежних змінних існує взаємно однозначна відповідність між однопараметричними сім'ями його розв'язків і його n -вимірними ультрасингулярними модулями редукції. А саме, кожному модулю вказаного типу відповідає сім'я розв'язків, інваріантних відносно цього модуля. Задачі побудови всіх однопараметричних сімей розв'язків рівняння \mathcal{L} і вичерпного опису його n -вимірних ультрасингулярних модулів редукції повністю еквівалентні.

Доведення. Нехай Q — n -вимірний ультрасингулярний модуль редукції рівняння \mathcal{L} . З твердження випливає, що анзац $\Phi(x, u) = \varphi$ побудований за допомогою модуля Q , редукує рівняння \mathcal{L} до тотожності. Іншими словами, для кожного значення сталої φ цей анзац неявно визначає розв'язок рівняння \mathcal{L} .

Навпаки, припустимо що $\mathcal{F} = \{u = f(x, \varkappa)\}$ — сім'я розв'язків рівняння \mathcal{L} , яка параметризована одним параметром \varkappa . Оскільки цей параметр є суттєвим і внаслідок чого похідна f_\varkappa є ненульовою, параметр \varkappa можна виразити із співвідношення $u = f(x, \varkappa)$. У результаті отримуємо, що $\varkappa = \Phi(x, u)$ для деякої функції $\Phi = \Phi(x, u)$ з $\Phi_u \neq 0$. Розглянемо

модуль $Q = \langle Q_1, \dots, Q_n \rangle$, де $Q_s = \partial_s + \eta^s \partial_u$, причому коефіцієнти $\eta^s = \eta^s(x, u)$ визначено як $\eta^s = -\Phi_s/\Phi_u$. Це n -вимірний інволютивний модуль і $Q[u] = 0$ для будь-якого елемента сім'ї \mathcal{F} . Анзац $u = f(x, \varphi)$, де φ — нова невідома (нуль-арна) функція, відповідає модулю Q і редукує рівняння \mathcal{L} до тотожності. Це означає, що Q — ультрасингулярний модуль редукції для рівняння \mathcal{L} .

Однопараметричні сім'ї $\mathcal{F} = \{u = f(x, \varkappa)\}$ і $\tilde{\mathcal{F}} = \{u = \tilde{f}(x, \tilde{\varkappa})\}$ називають еквівалентними, якщо вони складаються з тих самих функцій і відрізняються лише параметризацією, тобто якщо існує функція $\zeta = \zeta(\varkappa)$ така, що $\zeta_{\varkappa} \neq 0$ і $f(x, \zeta(\varkappa)) = \tilde{f}(x, \tilde{\varkappa})$. Це виконується тоді і лише тоді, коли функції $\Phi = \Phi(x, u)$ і $\tilde{\Phi} = \tilde{\Phi}(x, u)$, асоційовані відповідно з сім'ями \mathcal{F} і $\tilde{\mathcal{F}}$, є функціонально залежними, точніше $\tilde{\Phi} = \zeta(\Phi)$. Отже, еквівалентні однопараметричні сім'ї розв'язків відповідають одному і тому ж ультрасингулярному модулю редукції Q рівняння \mathcal{L} і, навпаки, будь-які дві однопараметричні сім'ї Q -інваріантних розв'язків є еквівалентними.

Наслідок. Система визначальних рівнянь на коефіцієнти ультрасингулярних модулів редукції рівняння \mathcal{L} , яка складається з рівняння (1) і рівняння $\tilde{L} = 0$, зводиться композицією нелокальної підстановки $\eta^s = -\Phi_s/\Phi_u$, де Φ — функція змінних x, u , та перетворення годографа

$$\text{нові незалежні змінні:} \quad \tilde{x}_i = x_i, \quad \varkappa = \Phi,$$

$$\text{нова залежна змінна:} \quad \tilde{u} = u$$

до початкового рівняння \mathcal{L} на функцію $\tilde{u} = \tilde{u}(\tilde{t}, \tilde{x}, \varkappa)$, де \varkappa відіграє роль параметра.

Зауважимо, що редукцію диференціальних рівнянь до алгебраїчних з використанням неklasичних симетрій розглянуто в роботі [12], де отримано твердження, аналогічне вищенаведеної теоремі. Але використання поняття сингулярних операторів редукції дозволяє сформулювати цей результат точніше.

Автор висловлює подяку Р. О. Поповичу за корисні дискусії та обговорення результатів роботи.

1. Bluman G. W., Cole J. D. The general similarity solution of the heat equation // J. Math. Mech. – 1969. – 18. – P. 1025–1042.
2. Kunzinger M., Popovych R. O. Singular reduction operators in two dimensions // J. Phys. A: Math. Theor. – 2008. – 41. – 505201, 24 p.
3. Kunzinger M., Popovych R. O. Is a nonclassical symmetry a symmetry? // Proc. of 4th Workshop “Group Analysis of Differential Equations and Integrable Systems” (October 26–30, 2008, Protaras, Cyprus). – Nicosia: University of Cyprus, 2009. – P. 107–120.
4. Boyko V. M., Kunzinger M., Popovych R. O. Singular reduction modules of differential equations. – arXiv: 1201.3223.
5. Fushchych W. I., Tsyfra I. M. On a reduction and solutions of the nonlinear wave equations with broken symmetry // J. Phys. A: Math. Gen. – 1987. – 20. – L45–L48.
6. Levi D., Winternitz P. Non-classical symmetry reduction: example of the Boussinesq equation // J. Phys. A: Math. Gen. – 1989. – 22. – P. 2915–2924.
7. Фуцич В. И., Штелень В. М., Серов Н. И. Симметричный анализ и точные решения нелинейных уравнений математической физики. – Киев: Наук. думка, 1989. – 336 с.
8. Fushchych W. I., Zhdanov R. Z. Conditional symmetry and reduction of partial differential equations // Ukr. Math. J. – 1992. – 44. – P. 875–886.
9. Vorob'ev E. M. Reduction and quotient equations for differential equations with symmetries // Acta Appl. Math. – 1991. – 51. – P. 1–24.

10. *Olver P. J., Vorob'ev E. M.* Nonclassical and conditional symmetries / CRC Handbook of Lie Group Analysis of Differential Equations. Vol. 3 / Ed. by N. H. Ibragimov. – Boca Raton: CRC Press, 1996. – P. 291–328.
11. *Zhdanov R. Z., Tsyfra I. M., Popovych R. O.* A precise definition of reduction of partial differential equations // J. Math. Anal. Appl. – 1999. – **238**. – P. 101–123.
12. *Grundland A. M., Tafel J.* On the existence of nonclassical symmetries of partial differential equations // J. Math. Phys. – 1995. – **36**. – P. 1426–1434.

Інститут математики НАН України, Київ

Надійшло до редакції 12.09.2013

В. Н. Бойко

Редукция дифференциальных уравнений к алгебраическим

В терминах сингулярных модулей редукции, т. е. сингулярных модулей неклассической (условной) симметрии, изучен вопрос редукции дифференциальных уравнений к алгебраическим уравнениям.

V. M. Boyko

Reduction of differential equations to algebraic ones

In terms of singular reduction modules, i. e. singular modules of a nonclassical (conditional) symmetry, the question of reduction of differential equations to algebraic ones is studied.

О регулярных решениях задачи Дирихле для уравнений Бельтрами

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины В. Я. Гутлянским)

Устанавливаются критерии существования регулярных решений задачи Дирихле для вырожденных уравнений Бельтрами первого рода в произвольных жордановых областях с граничными функциями, допускающими не более счетного числа точек разрыва. В частности, установлено существование регулярных решений для произвольных граничных функций ограниченной вариации.

Данная работа является естественным продолжением наших статей [1, 2], где можно найти историю вопроса и решение задачи Дирихле для случая непрерывных граничных функций (см. также [3]). Мы устанавливаем критерии существования регулярных решений задачи Дирихле в произвольных жордановых областях для граничных данных, допускающих не более счетного числа разрывов, и в частности для произвольных функций ограниченной вариации.

Пусть D — жорданова область в комплексной плоскости \mathbb{C} , пусть $\mu: D \rightarrow \mathbb{C}$ — измеримая функция с $|\mu(z)| < 1$ п. в. Уравнением Бельтрами первого рода называется уравнение вида

$$f_{\bar{z}} = \mu(z)f_z, \quad (1)$$

где $f_{\bar{z}} = \bar{\partial}f = (f_x + if_y)/2$, $f_z = \partial f = (f_x - if_y)/2$, $z = x + iy$, f_x и f_y — частные производные отображения f по x и y соответственно. Функция μ называется комплексным коэффициентом, а

$$K_\mu(z) = \frac{1 + |\mu(z)|}{1 - |\mu(z)|}$$

дилатацией уравнения (1). Уравнение (1) называется вырожденным, если дилатация K_μ является существенно неограниченной, т. е. $K_\mu \notin L^\infty(D)$.

Задача Дирихле для уравнений Бельтрами (1) в ограниченной области D комплексной плоскости \mathbb{C} для непрерывной граничной функции $\varphi: \partial D \rightarrow \mathbb{R}$ состояла в нахождении непрерывной функции $f: D \rightarrow \mathbb{C}$, имеющей частные производные первого порядка п. в. и удовлетворяющей уравнению (1) п. в., а также граничному условию

$$\lim_{z \rightarrow \zeta} \operatorname{Re} f(z) = \varphi(\zeta) \quad \forall \zeta \in \partial D \quad (2)$$

для предписанной непрерывной функции $\varphi: \partial D \rightarrow \mathbb{R}$.

При $\varphi: \partial D \rightarrow \mathbb{R}$, $\varphi(\zeta) \not\equiv \text{const}$, допускающей не более счетного числа точек разрыва, под регулярным решением такой задачи будем понимать непрерывное в \mathbb{C} , дискретное и открытое отображение $f: D \rightarrow \mathbb{C}$ класса Соболева $W_{\text{loc}}^{1,1}$ с якобианом $J_f(z) = |f_z|^2 - |f_{\bar{z}}|^2 \neq 0$ п. в., удовлетворяющее условию (2) в точках непрерывности φ и п. в. (1). Напомним,

что отображение $f: D \rightarrow \mathbb{C}$ дискретно, если прообраз $f^{-1}(y)$ каждой точки $y \in \mathbb{C}$ состоит из изолированных точек, и открыто, если образ любого открытого множества $U \subseteq D$ является открытым множеством в \mathbb{C} .

Напомним, что в случае $\mu(z) \equiv 0$ теорема существования решения задачи Дирихле в жордановых областях для граничных функций, допускающих не более счетного числа точек разрыва, хорошо известна (см., например, секцию 3 гл. VI в [4]).

Следуя работе [5], говорим, что функция $\phi: D \rightarrow \mathbb{R}$ имеет конечное среднее колебание в точке $z_0 \in D$, пишем $\phi \in \text{FMO}(z_0)$, если

$$\overline{\lim}_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{B(z_0, \varepsilon)} |\phi(z) - \tilde{\phi}_\varepsilon| dm(z) < \infty, \quad (3)$$

где $B(z_0, \varepsilon) = \{z \in \mathbb{C}: |z - z_0| < \varepsilon\}$, а $\tilde{\phi}_\varepsilon$ — среднее значение ϕ в круге $B(z_0, \varepsilon)$. Пишем $\phi \in \text{FMO}(D)$, если (3) выполнено для каждой точки $z_0 \in D$. Также пишем $\phi \in \text{FMO}(\overline{D})$, если ϕ задана в некоторой области G в \mathbb{C} , содержащей \overline{D} , и $\phi \in \text{FMO}(z_0)$ для всех $z_0 \in \overline{D}$.

1. Основная лемма. Начнем с общего критерия существования регулярных решений задачи Дирихле (2) для уравнения Бельтрами (1) в произвольных жордановых областях. Далее и, в частности, в условии (4) мы предполагаем, что K_μ продолжена нулем вне D .

Лемма 1. Пусть D — жорданова область в \mathbb{C} , $\mu: D \rightarrow \mathbb{C}$ — измеримая функция с $|\mu(z)| < 1$ п. в. и $K_\mu \in L^1(D)$. Предположим, что для каждого $z_0 \in \overline{D}$ выполнено условие

$$\int_{\varepsilon < |z - z_0| < \varepsilon_0} K_\mu(z) \cdot \psi_{z_0, \varepsilon}^2(|z - z_0|) dm(z) = o(I_{z_0}^2(\varepsilon)) \quad \text{при} \quad \varepsilon \rightarrow 0 \quad (4)$$

для семейства измеримых функций $\psi_{z_0, \varepsilon}: (0, \infty) \rightarrow (0, \infty)$, $\varepsilon \in (0, \delta(z_0))$, таких, что

$$0 < I_{z_0}(\varepsilon) := \int_{\varepsilon}^{\delta(z_0)} \psi_{z_0, \varepsilon}(t) dt < \infty.$$

Тогда уравнение Бельтрами (1) имеет регулярное решение f задачи Дирихле (2) для любой ограниченной функции $\varphi: \partial D \rightarrow \mathbb{R}$, допускающей не более счетного числа точек разрыва.

Действительно, пусть F — регулярное гомеоморфное решение уравнения Бельтрами (1) класса $W_{\text{loc}}^{1,1}$, которое является кольцевым Q -гомеоморфизмом в \overline{D} с $Q = K_\mu$ и которое существует по лемме 4.1 из [6] в силу условия (4). Заметим, что $\overline{\mathbb{C}} \setminus D^*$, где $D^* = F(D)$, не может состоять из единственной точки ∞ , так как в противном случае граница D^* являлась бы слабо плоской и по леммам 6.6 и 6.7 в [7] отображение F должно было иметь гомеоморфное продолжение в \overline{D} , что невозможно, поскольку граница D состоит более чем из одной точки. Кроме того, область D^* односвязна (см., например, лемму 5.3 в [5] или лемму 6.5 в [8]). Таким образом, по теореме Римана (см., например, II.2.1 в [4]), D^* можно отобразить на единичный круг $\mathbb{D} = \{z \in \mathbb{C}: |z| < 1\}$ с помощью конформного отображения R . Ввиду инвариантности модуля при конформных отображениях, $g := R \circ F$ вновь является регулярным гомеоморфным решением уравнения Бельтрами (1), которое является кольцевым Q -гомеоморфизмом в \overline{D} с $Q = K_\mu$ и отображает D на \mathbb{D} . Более того, по леммам 6.6 и 6.7 в [7], g допускает продолжение до гомеоморфизма $g_*: \overline{D} \rightarrow \overline{\mathbb{D}}$, поскольку \mathbb{D} имеет слабо плоскую границу, а жорданова область D локально связна на границе.

Будем искать решение исходной задачи Дирихле (2) в виде композиции $f = h \circ g$, где h — аналитическая функция в \mathbb{D} с граничным условием в точках непрерывности

$$\lim_{z \rightarrow \zeta} \operatorname{Re} h(z) = \varphi(g_*^{-1}(\zeta)).$$

Существование гармонической функции $\operatorname{Re} h$ известно (см., например, секцию 3 гл. VI из [4]), и аналитическая функция h восстанавливается в \mathbb{D} по ее действительной части с точностью до чисто мнимой аддитивной постоянной. Как легко видеть, функция $f = h \circ g$ дает искомое регулярное решение задачи Дирихле (2) для уравнения Бельтрами (1).

2. Основные результаты. Выбирая в лемме 1 специальную функцию $\psi_{z_0, \varepsilon}(t) = 1/t \log(1/t)$ (см., например, лемму 5.3 в [7]), получаем:

Теорема 1. Пусть $\mu: D \rightarrow \mathbb{C}$ — измеримая в жордановой области D функция такая, что $|\mu(z)| < 1$ п. в. и $K_\mu(z) \leq Q(z)$ п. в. для функции $Q: \mathbb{C} \rightarrow [0, \infty]$ класса $\text{FMO}(\overline{D})$. Тогда для любой ограниченной функции $\varphi: \partial D \rightarrow \mathbb{R}$, допускающей не более счетного числа точек разрыва, уравнение Бельтрами (1) имеет регулярное решение задачи Дирихле (2).

Следствие 1. В частности, заключение теоремы 1 остается в силе, если $K_\mu(z) \leq Q(z)$ п. в. для функции $Q: \mathbb{C} \rightarrow [0, \infty]$ класса $\text{ВМО}(\overline{D})$.

Кроме того, в силу достаточных условий FMO (см., например, предложение 2.2 и следствие 2.1 в [7]), имеем также:

Следствие 2. Заключение теоремы 1 остается в силе, если $K_\mu(z) \leq Q(z)$ п. в. для локально интегрируемой функции $Q: \mathbb{C} \rightarrow [0, \infty]$ такой, что все точки $z \in \overline{D}$ являются ее точками Лебега.

Следствие 3. Заключение теоремы 1 также имеет место, если

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{B(z_0, \varepsilon)} K_\mu(z) dm(z) < \infty \quad \forall z_0 \in \overline{D}.$$

Теорема 2. Пусть $\mu: D \rightarrow \mathbb{C}$ — измеримая в жордановой области D функция с $|\mu(z)| < 1$ п. в. такая, что $K_\mu \in L^1(D)$, и

$$\int_0^{\delta(z_0)} \frac{dr}{\|K_\mu(z_0, r)\|(r)} = \infty \quad \forall z_0 \in \overline{D},$$

где $\|K_\mu\|(z_0, r) = \int_{\gamma_r} K_\mu(z) |dz|$ — нормы в L^1 функции K_μ на окружностях $S(z_0, r) = \{z \in \mathbb{C}: |z - z_0| = r\}$, $0 < r < \delta(z_0) < d(z_0)$, $d(z_0) = \sup_{z \in D} |z - z_0|$. Тогда уравнение Бельтрами (1) имеет регулярное решение задачи Дирихле (2) для любой ограниченной функции $\varphi: \partial D \rightarrow \mathbb{R}$, допускающей не более счетного числа точек разрыва.

Теорема получается из леммы 1 с $\psi_{z_0, \varepsilon}(t) \equiv 1/\|K_\mu\|(z_0, t)$, $t \in (0, \delta(z_0))$.

Следствие 4. В частности, заключение теоремы 2 имеет место, если

$$k_{z_0}(\varepsilon) = O\left(\log \frac{1}{\varepsilon}\right) \quad \text{при} \quad \varepsilon \rightarrow 0 \quad \forall z_0 \in \overline{D},$$

где $k_{z_0}(\varepsilon)$ — среднее значение функции K_μ на окружности $S(z_0, \varepsilon)$.

Наконец, по теореме 2.3 и 2.4 в [7], получаем следующую теорему из теоремы 2.

Теорема 3. Пусть $\mu: D \rightarrow \mathbb{C}$ — измеримая в жордановой области D функция с $|\mu(z)| < 1$ п. в. такая, что

$$\int_D \Phi(K_\mu(z)) dm(z) < \infty,$$

где $\Phi: \overline{\mathbb{R}}_+ \rightarrow \overline{\mathbb{R}}_+$ — неубывающая выпуклая функция с условием

$$\int_\delta^\infty \frac{d\tau}{\tau \Phi^{-1}(\tau)} = \infty$$

для некоторого $\delta > \Phi(0)$. Тогда уравнение Бельтрами (1) имеет регулярное решение задачи Дирихле (2) для любой ограниченной функции $\varphi: \partial D \rightarrow \mathbb{R}$, допускающей не более счетного числа точек разрыва.

Следствие 5. В частности, заключение теоремы 3 имеет место, если при некотором $\alpha > 0$

$$\int_D e^{\alpha K_\mu(z)} dm(z) < \infty.$$

Замечание 1. В частности, все приведенные теоремы имеют место для функций φ ограниченной вариации.

1. Ковтонюк Д. А., Петков И. В., Рязанов В. И. К задаче Дирихле для уравнений Бельтрами // Доп. НАН України. — 2012. — № 6. — С. 30–33.
2. Ковтонюк Д. А., Петков И. В., Рязанов В. И. О задаче Дирихле для уравнений Бельтрами в конечносвязных областях // Укр. мат. журн. — 2012. — **64**, № 7. — С. 932–944.
3. Wojarski B., Gutlyanskii V., Ryazanov V. Dirichlet problem for general degenerate Beltrami equation in Jordan domains // Укр. мат. вісн. — 2012. — **9**, No 4. — С. 460–476.
4. Голузин Г. М. Геометрическая теория функций комплексного переменного. — Москва: Наука, 1966. — 630 с.
5. Игнатъев А. А., Рязанов В. И. Конечное среднее колебание в теории отображений // Укр. мат. вестн. — 2005. — **2**, № 3. — С. 395–417.
6. Ryazanov V., Srebro U., Yakubov E. On strong solutions of the Beltrami equations // Complex Var. Elliptic Equat. — 2010. — **55**, No 1–3. — P. 219–236.
7. Gutlyanskii V., Ryazanov V., Srebro U., Yakubov E. The Beltrami equation: a geometric approach. — New York: Springer, 2012. — 301 p. — (Developments in Mathematics; Vol. 26.)
8. Martio O., Ryazanov V., Srebro U., Yakubov E. Moduli in modern mapping theory. — New York: Springer, 2009. — 367 p. — (Springer Monographs in Mathematics.)

Институт прикладной математики
и механики НАН Украины, Донецк

Поступило в редакцию 24.09.2013

Д. О. Ковтонюк, І. В. Петков, В. І. Рязанов

Про регулярні розв'язки задачі Діріхле для рівнянь Бельтрамі

Встановлено критерії існування регулярних розв'язків задачі Діріхле для вироджених рівнянь Бельтрамі першого роду в довільних жорданових областях з граничними функціями, що допускають не більше зліченного числа точок розриву. Зокрема, встановлено існування регулярних розв'язків для довільних граничних функцій обмеженої варіації.

D. A. Kovtonyuk, I. V. Petkov, V. I. Ryazanov

On the regular solutions of the Dirichlet problem for Beltrami equations

The criteria of existence of regular solutions of the Dirichlet problem for degenerate Beltrami equations of the first kind in arbitrary Jordan domains with the boundary functions admitting at most a countable number of discontinuity points are established. In particular, the existence of regular solutions for arbitrary boundary functions of bounded variation is proved.

Д. В. Королюк

Диффузионная аппроксимация статистических экспериментов с настойчивой линейной регрессией и эквilibриумом

(Представлено академиком НАН Украины И. Н. Коваленко)

Предложена аппроксимация статистических экспериментов с настойчивой линейной регрессией и эквilibриумом марковскими процессами в дискретно-непрерывном времени: $k = [Nt]$, $0 \leq t \leq T$, для которых обоснована диффузионная аппроксимация типа Орнштейна–Уленбека с непрерывным временем.

В настоящей работе предлагается математическая модель статистических экспериментов (СЭ) с настойчивой линейной регрессией и эквilibриумом в дискретно-непрерывном времени. Диффузионная аппроксимация модели осуществляется процессом типа Орнштейна–Уленбека с непрерывным временем. Исходная модель цепи Маркова в дискретно-непрерывном времени возникает в результате масштабирования дискретного времени, а также параметров статистических экспериментов.

1. Постановка задачи. Бинарные повторяющиеся СЭ задаются значениями сумм выборки $\delta(k) = (\delta_r(k), 1 \leq r \leq N)$, $k \geq 0$ независимых и одинаково распределенных при каждом фиксированном k случайных величин $\delta_r(k)$, $1 \leq r \leq N$, принимающих два значения ± 1 :

$$S_N(k) := \frac{1}{N} \sum_{r=1}^N \delta_r(k), \quad k \geq 0. \quad (1)$$

Настойчивая линейная регрессия означает, что имеет место соотношение

$$E[S_N(k+1)|S_N(k)] = C(S_N(k)), \quad k \geq 0, \quad (2)$$

в котором функция линейной регрессии не зависит от объема выборки N и от номера $k \geq 0$, и задается соотношением

$$C(s) = (1-a)s + a\rho, \quad |s| \leq 1. \quad (3)$$

Параметр ρ служит эквilibриумом функции регрессии

$$C(\rho) = \rho. \quad (4)$$

Направляющий параметр a удовлетворяет условию $0 < a < 1$. При $a = 0$ регрессия исчезает.

Задание СЭ с настойчивой линейной регрессией и эквilibриумом (1)–(3) означает, что вероятности выборочных значений определяются формулами

$$P\{\delta_r(k+1) = \pm 1 \mid S_N(k) = s\} = \frac{1}{2}[1 \pm C(s)]. \quad (5)$$

При этом параметры a и ρ могут быть заданы так, что условие (5) корректно определено.

Функция регрессии (2) преобразуется к следующему виду:

$$\begin{aligned} C(s) &= s + C_0(s) = \rho + C_\rho(s), \\ C_0(s) &= -a(s - \rho), \quad C_\rho(s) = (1 - a)(s - \rho). \end{aligned} \quad (6)$$

Так что дополнительные функции в (6) удовлетворяют условиям

$$C_0(\rho) = C_\rho(\rho) = 0. \quad (7)$$

Кроме того, задание бинарных СЭ (1)–(3) обеспечивает явный вид условной дисперсии

$$\begin{aligned} D[S_N(k+1)|S_N(k)] &= \frac{B(S_N(k))}{N}, \quad k \geq 0, \\ B(s) &= 1 - C^2(s). \end{aligned} \quad (8)$$

2. Эквилибриум и аппроксимация СЭ нормальным процессом авторегрессии.

В предыдущей работе [2] установлена сходимость к эквилибриуму

Теорема 1 (ср. [2, теорема 1]). *При сходимости начальных условий (с вероятностью 1)*

$$S_N(0) \xrightarrow{P1} \rho, \quad N \rightarrow \infty,$$

имеет место сходимость СЭ (1)–(3) (с вероятностью 1):

$$S_N(k) \xrightarrow{P1} \rho, \quad N \rightarrow \infty,$$

при каждом конечном $k > 0$.

Предложена также аппроксимация СЭ (1)–(3) дискретным нормальным процессом авторегрессии, основанная на следующей теореме.

Теорема 2 (ср. [2, теорема 2]). *При выполнении условия теоремы 1 имеет место сходимость по распределению*

$$\sqrt{N}[S_N(k+1) - C(S_N(k))] \xrightarrow{d} \sigma W(k+1), \quad N \rightarrow \infty,$$

при каждом конечном $k \geq 0$.

Результат теоремы 2 служит основанием задания процесса нормальной авторегрессии $\widetilde{S}_N(k)$, $1 \leq r \leq N$, $k \geq 0$ в следующем виде:

Предложение 1 (дискретная аппроксимация). *Процесс нормальной авторегрессии в дискретном времени $k \geq 0$ задается соотношением*

$$\widetilde{S}_N(k+1) = C(\widetilde{S}_N(k)) + \frac{\sigma}{\sqrt{N}}W(k+1), \quad k \geq 0, \quad (9)$$

в котором предельная дисперсия

$$\sigma^2 = 1 - \rho^2, \quad (10)$$

а $W(k+1)$, $k \geq 0$ — нормально распределенные стандартные случайные величины, независимые при разных $k \geq 1$.

Замечание 1. Процесс нормальной авторегрессии (6) сохраняет свойство настойчивой линейной регрессии

$$E[\widetilde{S}_N(k+1)|\widetilde{S}_N(k)] = C(\widetilde{S}_N(k)), \quad k \geq 0,$$

с той же функцией регрессии (3), что и исходный СЭ (1).

Естественно рассматривать асимптотическое поведение нормированных флуктуаций СЭ относительно эквilibриума ρ :

$$\zeta_N(k) := \sqrt{N}[S_N(k) - \rho], \quad k \geq 0. \quad (11)$$

Функция регрессии (3) для флуктуаций теперь имеет вид

$$E[\zeta_N(k+1)|\zeta_N(k) = s] = (1-a)s, \quad k \geq 0. \quad (12)$$

В дальнейшем будет использована условная регрессия для приращений нормированных флуктуаций СЭ относительно эквilibриума ρ :

$$\Delta\zeta_N(k) := \zeta_N(k+1) - \zeta_N(k), \quad k \geq 0. \quad (13)$$

При этом

$$E[\Delta\zeta_N(k)|\zeta_N(k) = s] = -as, \quad k \geq 0. \quad (14)$$

Нам также понадобится разложение приращений нормированных флуктуаций в следующей форме:

$$\Delta\zeta_N(k) := \mu_N(k+1) - a\zeta_N(k), \quad k \geq 0, \quad (15)$$

в которой мартингал-разность

$$\mu_N(k+1) := \Delta\zeta_N(k) + a\zeta_N(k), \quad k \geq 0, \quad (16)$$

характеризуется следующими свойствами:

$$\begin{aligned} E[\mu_N(k+1)|\zeta_N(k)] &= 0, \quad k \geq 0, \\ E[\mu_N^2(k+1)|\zeta_N(k)] &= B\left(\rho + \frac{\zeta_N(k)}{\sqrt{N}}\right), \quad k \geq 0, \end{aligned} \quad (17)$$

$$B(s) := 1 - C^2(s).$$

3. Диффузионная аппроксимация СЭ в дискретно-непрерывном времени.

Диффузионная аппроксимация строится для нормированных флуктуаций (11) при масштабировании дискретного времени $k = [Nt]$, $t \geq 0$.

Предложение 2. *Марковский процесс с дискретно-непрерывным временем $\zeta_N^0(t)$, $t \geq 0$ задается следующим разностным стохастическим уравнением для приращений:*

$$\Delta\zeta_N^0(t) = -\frac{a\zeta_N^0(t)}{N} + \frac{\Delta\mu_N^0(t)}{\sqrt{N}}, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (18)$$

в котором мартингал-разности $\Delta\mu_N^0(t)$ характеризуются свойствами

$$\begin{aligned} E[\Delta\mu_N^0(t)|\zeta_N^0(t)] &= 0, \\ E[(\Delta\mu_N^0(t))^2|\zeta_N^0(t)] &= B\left(\rho + \frac{\zeta_N^0(t)}{\sqrt{N}}\right). \end{aligned} \quad (19)$$

Основной результат настоящей работы сформулирован в следующей теореме.

Теорема 3. При сходимости (по вероятности) начальных условий

$$\zeta_N^0(0) \xrightarrow{P} \zeta^0, \quad N \rightarrow \infty,$$

имеет место сходимость конечномерных распределений процессов

$$\zeta_N^0(t) \xrightarrow{D} \zeta^0(t), \quad N \rightarrow \infty, \quad (20)$$

к предельному диффузионному процессу $\zeta^0(t)$, $t \geq 0$, типа Орнштейна–Уленбека, задаваемого производящим оператором (генератором)

$$L^0\varphi(s) = -as\varphi'(s) + \frac{1}{2}\sigma^2\varphi''(s), \quad \sigma^2 = 1 - \rho^2. \quad (21)$$

Аналогичный результат можно сформулировать для масштабированного процесса нормальной авторегрессии аппроксимирующего СЭ (9)–(10).

Предложение 3. Процесс нормальной авторегрессии в дискретно-непрерывном времени задается приращениями

$$\Delta\widetilde{\zeta}_N^0(t) = -\frac{a\widetilde{\zeta}_N^0(t)}{N} + \left(\frac{\sigma}{\sqrt{N}}\right)\Delta W(t), \quad 0 \leq t \leq T. \quad (22)$$

Мартингальная составляющая в формуле (22) задается приращениями стандартного нормального процесса $W(t)$, $t \geq 0$:

$$\Delta W(t) := W(t+1) - W(t),$$

которые характеризуются двумя моментами:

$$E\Delta W(t) = 0, \quad E[\Delta W(t)]^2 = 1. \quad (23)$$

Теорема 4. При сходимости (по вероятности) начальных условий

$$\zeta_N^0(0) \xrightarrow{P} \zeta^0, \quad N \rightarrow \infty,$$

имеет место сходимость конечномерных распределений процесса нормальной авторегрессии, задаваемого соотношениями (22)–(23):

$$\widetilde{\zeta}_N^0(t) \xrightarrow{D} \zeta^0(t), \quad N \rightarrow \infty, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (24)$$

к диффузионному процессу $\zeta^0(t)$ типа Орнштейна–Уленбека, задаваемого генератором (21), причем диффузионный процесс $\zeta^0(t)$, $t \geq 0$ является решением стохастического дифференциального уравнения

$$d\zeta^0(t) = -a\zeta^0(t)dt + \sigma dW(t). \quad (25)$$

4. Обоснование диффузионной аппроксимации. Основная идея доказательства предельных теорем для марковских случайных процессов состоит в применении операторной характеристики марковского процесса (генератором) на классе числовых функций с аргументом во множестве значений марковского процесса. Сходимость производящих операторов на достаточно богатом классе числовых функций обеспечивает сходимость конечномерных распределений процессов [3, 4].

Следуя монографии [4] (см. также [5]), введем генератор марковских процессов в схеме серий

$$L_N\varphi(s) = NE[\varphi(s + \Delta\zeta_N^0(t)) - \varphi(s)|\zeta_N^0(t) = s]. \quad (26)$$

Существенный этап доказательства теоремы 3 состоит в применении теоремы 1 А.В. Скорохода [4; 2 : 1], из которой следует сходимость (20) конечномерных распределений флюктуаций СЭ относительно эквилибриума.

Существенный этап доказательства теоремы 3 содержится в следующей лемме.

Лемма 1. *Имеет место сходимость генераторов (26):*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} L_N\varphi(s) = L^0\varphi(s), \quad \varphi(s) \in C^3(\mathbb{R}) \quad (27)$$

на классе $C^3(\mathbb{R})$ числовых финитных функций, трижды непрерывно дифференцируемых с ограниченными производными. Предельный генератор

$$L^0\varphi(s) = -as\varphi'(s) + \frac{1}{2}\sigma^2\varphi''(s), \quad \sigma^2 = 1 - \rho^2 \quad (28)$$

задает предельный процесс типа Орнштейна–Уленбека (25).

Доказательство. Используя представление приращений (18) марковского процесса флюктуаций $\zeta_N^0(t)$, $t \geq 0$, вычислим первые два момента приращений.

С учетом (19) находим

$$E[\Delta\zeta_N^0(t)|\zeta_N^0(t) = s] = -\frac{as}{N}, \quad (29)$$

$$E[(\Delta\zeta_N^0(t))^2|\zeta_N^0(t) = s] = \frac{B(\rho)}{N} + O\left(\frac{1}{N^{3/2}}\right). \quad (30)$$

Здесь (см. формулу (8), а также (3))

$$B(\rho) = 1 - C^2(\rho) = 1 - \rho^2 =: \sigma^2. \quad (31)$$

Теперь применим формулу Тейлора в представлении (26) генератора L_N к тест-функции $\varphi(s) \in C^3(\mathbb{R})$:

$$L_N\varphi(s) = N \left[E[\Delta\zeta_N^0(t)|\zeta_N^0(t) = s]\varphi'(s) + E[(\Delta\zeta_N^0(t))^2|\zeta_N^0(t) = s]\frac{1}{2}\varphi''(s) + R_N\varphi(s) \right]. \quad (32)$$

Здесь остаточный член по условию теоремы 3 имеет оценку

$$R_N\varphi(s) = O\left(\frac{1}{N^2}\right),$$

Используя представления (29), (30) первых двух моментов приращений, получаем

$$L_N\varphi(s) = L^0\varphi(s) + NR_N\phi(s), \quad (33)$$

в котором остаточный член

$$NR_N\varphi(s) \rightarrow 0, \quad N \rightarrow \infty, \quad \varphi(s) \in C^3(\mathbb{R}). \quad (34)$$

Из представлений (33), (34) следует утверждение леммы 1.

Аналогично доказывается теорема 4. Введем генератор приращений (22) марковского процесса $\widetilde{\zeta}_N^0(t)$, $t \geq 0$:

$$\widetilde{L}_N\varphi(s) = N[E[\varphi(s + \Delta\widetilde{\zeta}_N^0(t)) - \varphi(s)] | \widetilde{\zeta}_N^0(t) = s]. \quad (35)$$

Вычисляются первые два момента приращений с учетом (23):

$$\begin{aligned} E[\Delta\widetilde{\zeta}_N^0(t) | \widetilde{\zeta}_N^0(t) = s] &= -\frac{as}{N}, \\ E[(\Delta\widetilde{\zeta}_N^0(t))^2 | \widetilde{\zeta}_N^0(t) = s] &= \sigma^2 + O\left(\frac{1}{N^{3/2}}\right). \end{aligned} \quad (36)$$

Теперь аналогично доказывается следующая лемма.

Лемма 2. *Имеет место сходимость генераторов (35), (36)*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \widetilde{L}_N\varphi(s) = L^0\varphi(s), \quad \varphi(s) \in C^3(\mathbb{R}), \quad (37)$$

на классе числовых финитных функций $C^3(\mathbb{R})$ трижды непрерывно дифференцированных с ограниченными производными. Предельный генератор L^0 задается представлением (28).

Утверждение теоремы 4 следует из леммы 2 с применением теоремы 9 [6, с. 415].

Замечание 2. Утверждение теоремы 4 можно получить в виде следствия теоремы 8 [6, с. 406], используя следующее представление решения разностного стохастического уравнения (22):

$$\widetilde{\zeta}_N^0(t) = \widetilde{\zeta}_N^0(0) - a \int_0^{[Nt]/N} \widetilde{\zeta}_N^0(\tau) d\tau + \frac{\sigma}{\sqrt{N}} W([Nt]). \quad (38)$$

При этом следует проверить выполнимость условий теоремы 8 [6, с.406] для функций

$$\begin{aligned} a_N(t, s) &= NEf_N(t, s; W), \\ B(t, s) &= NEf_N^2(t, s; W), \\ f_N(t, s; W) &:= -\frac{as}{N} + \frac{\sigma}{\sqrt{N}} W. \end{aligned} \quad (39)$$

Здесь W — нормально распределенная стандартная случайная величина ($EW = 0$, $EW^2 = 1$).

Приведенные в теоремах 3 и 4 аппроксимации флуктуаций СЭ могут быть использованы в статистическом анализе СЭ с применением методов математической статистики.

1. *Королюк Д. В.* Рекуррентные статистические эксперименты с настойчивой линейной регрессией // Укр. мат. вестн. – 2012. – **9**, № 4. – С. 560–567.
2. *Королюк Д. В.* Бинарные повторяющиеся статистические эксперименты с настойчивой линейной регрессией // Там же. – 2013. – **10**, № 4. – С. 497–506.
3. *Ethier S. N., Kurtz T. G.* Markov processes: characterization and convergence. – New York: Wiley, 1986. – 534 p.
4. *Скоруход А. В.* Асимптотические методы теории стохастических дифференциальных уравнений. – Киев: Наук. думка, 1987. – 328 с.
5. *Koroliuk V. S., Limnios N.* Stochastic systems in merging phase space. – Singapore; London: World Scientific, 2005. – 331 p.
6. *Гихман И. И., Скоруход А. В.* Стохастические дифференциальные уравнения и их приложения. – Киев: Наук. думка, 1982. – 611 с.

*Институт телекоммуникаций и глобального
информационного пространства
НАН Украины, Киев*

Поступило в редакцию 17.10.2013

Д. В. Королюк

Дифузійна апроксимація статистичних експериментів з наполегливою лінійною регресією та еквілібріумом

Запропоновано апроксимацію статистичних експериментів з наполегливою лінійною регресією та еквілібріумом марковськими процесами в дискретно-неперервному часі: $k = [Nt]$, $0 \leq t \leq T$, для яких обґрунтовано дифузійну апроксимацію типу Орнштейна–Уленбека з неперервним часом.

D. V. Koroliouk

Diffusion approximation of statistical experiments with persistent linear regression and equilibrium

We propose an approximation of statistical experiments with persistent linear regression and equilibrium by Markov processes in the discrete-continuous time: $k = [Nt]$, $0 \leq t \leq T$, for which the diffusion approximation of an Ornstein–Uhlenbeck-type process with continuous time is constructed.

Про один клас діагональних операторів у просторах аналітичних функцій та його застосування

(Представлено членом-кореспондентом НАН України М. Л. Горбачуком)

У просторах функцій, аналітичних у довільних областях, досліджено деякі властивості діагональних операторів, які породжені тейлорівськими коефіцієнтами узагальнених гіпергеометричних функцій. Одержані результати застосовані до вивчення властивостей узагальненого оператора Данкла.

Нехай G — довільна область комплексної площини, $\mathcal{H}(G)$ — простір усіх аналітичних у G функцій, що наділений топологією компактної збіжності, а $\mathcal{L}(\mathcal{H}(G))$ — множина всіх лінійних неперервних операторів, що діють в $\mathcal{H}(G)$. Оператор T з класу $\mathcal{L}(\mathcal{H}(G))$ називається діагональним, якщо

$$Tz^n = \gamma_n z^n, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (1)$$

де $(\gamma_n)_{n=0}^{\infty}$ — деяка послідовність комплексних чисел. У теорії операторів, що діють у просторах аналітичних функцій, цікавою і важливою є така задача: вказати необхідні та достатні умови на послідовність комплексних чисел $(\gamma_n)_{n=0}^{\infty}$, при виконанні яких оператор T , дія якого на степенях z визначається рівностями (1), продовжується до оператора з класу $\mathcal{L}(\mathcal{H}(G))$. Ці умови є досить простими для просторів функцій, аналітичних у кругових областях (див., наприклад, [1]). У роботі [2] у просторах функцій, аналітичних у зіркових відносно початку координат областях комплексної площини, досліджені діагональні оператори, які визначаються за допомогою тейлорівських коефіцієнтів функції Міттаг–Леффлера. Цей клас діагональних операторів використовувався при вивченні властивостей операторів узагальненого диференціювання та узагальненого інтегрування Гельфонда–Леонтєєва [3]. В роботах [4–6] розв'язувалася загальна задача про знаходження умов на послідовність комплексних чисел $(\gamma_n)_{n=0}^{\infty}$, за яких діагональний оператор T , який визначається рівностями (1), продовжується до оператора з класу $\mathcal{L}(\mathcal{H}(G))$. Ці умови формулюються в термінах аналітичного продовження характеристичних функцій відповідних діагональних операторів і їхнє використання при дослідженні властивостей конкретних операторів пов'язане зі значними технічними труднощами.

Метою даної роботи є дослідження деяких властивостей класу діагональних операторів, які породжені тейлорівськими коефіцієнтами узагальнених гіпергеометричних функцій. За допомогою цих властивостей вивчено деякі питання теорії операторів, які пов'язані з узагальненим оператором Данкла. В першій частині роботи встановлено можливість продовження зазначених вище діагональних операторів до операторів з класу $\mathcal{L}(\mathcal{H}(G))$ для зіркових відносно початку координат областей G комплексної площини. Встановлено умови ізоморфності таких операторів, а також досліджено можливість їхнього зображення у вигляді інтегральних операторів. Надалі для комплексного числа a і цілого невід'ємного числа n через $(a)_n$ позначатимемо символ Похгаммера, тобто $(a)_n = a(a+1)\cdots(a+n-1)$ при $n \geq 1$, $(a)_0 = 1$.

Теорема 1. Нехай G — довільна зіркова відносно початку координат область комплексної площини і $a \in \mathbb{C}$. Тоді діагональний оператор P_a , який на степенях z визначається формулами

$$P_a z^n = \frac{(a)_n}{n!} z^n, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (2)$$

продовжується до оператора з класу $\mathcal{L}(\mathcal{H}(G))$.

Якщо $0 < \operatorname{Re} a \leq 1$, то вказане продовження здійснюється формулою

$$(P_a f)(z) = \frac{1}{\Gamma(a)\Gamma(2-a)} \left(U_z \frac{d}{dz} + E \right) \left(\int_0^1 (1-t)^{1-a} t^{a-1} f(zt) dt \right),$$

де U_z — це оператор множення на незалежну змінну, а E — одиничний оператор. В загальному випадку доведення теореми стосовно продовження оператора P_a здійснюється індукцією за k , де $a \in \mathbb{C}$: $k-1 < \operatorname{Re} a \leq k$, і $k \in \mathbb{Z}$.

Теорема 2. Нехай G — довільна зіркова відносно початку координат область комплексної площини і $a \in \mathbb{C}$, причому $a \neq -n$, $n = 0, 1, \dots$. Тоді діагональний оператор P_a , який визначається формулами (2), продовжується до ізоморфізму з класу $\mathcal{L}(\mathcal{H}(G))$.

Наслідок 1. Нехай G — довільна зіркова відносно початку координат область комплексної площини, l — довільне фіксоване натуральне число, $a = (a_j)_{j=1}^l$, $b = (b_j)_{j=1}^l \in \mathbb{C}^l$, причому $a_j \neq -k$, $b_j \neq -k$, $j = \overline{1, l}$, $k = 0, 1, \dots$. Тоді діагональний оператор $S_{a,b}$, який на степенях z визначається формулами

$$S_{a,b} z^n = \frac{(a_1)_n (a_2)_n \cdots (a_l)_n}{(b_1)_n (b_2)_n \cdots (b_l)_n} z^n, \quad n = 0, 1, \dots,$$

продовжується до ізоморфізму з класу $\mathcal{L}(\mathcal{H}(G))$.

Нехай m — фіксоване натуральне число, $m \geq 2$, $\omega = \exp(2\pi i/m)$, G — довільна зіркова відносно початку координат і m -симетрична область комплексної площини, тобто $\omega G = G$. Через G^m позначимо множину $\{z^m : z \in G\}$. Тоді довільну функцію $f \in \mathcal{H}(G)$ можна єдиним способом зобразити у вигляді $f(z) = \sum_{j=0}^{m-1} z^j f_j(z^m)$, $z \in G$, де $f_j \in \mathcal{H}(G^m)$, $j = \overline{0, m-1}$ [7].

Теорема 3. Нехай G — довільна зіркова відносно початку координат та m -симетрична область комплексної площини, а $c^{(r)}$, $a_j^{(r)}$, $b_j^{(r)}$, $r = \overline{0, m-1}$, $j = \overline{1, m}$, — довільні комплексні числа, для яких виконуються умови: $c^{(r)} \neq 0$, $a_j^{(r)} \neq -n$, $b_j^{(r)} \neq -n$, $r = \overline{0, m-1}$, $j = \overline{1, m}$, $n = 0, 1, \dots$. Тоді діагональний оператор T , який на степенях z визначається рівностями

$$T z^{mn+r} = c^{(r)} \frac{(a_1^{(r)})_n (a_2^{(r)})_n \cdots (a_m^{(r)})_n}{(b_1^{(r)})_n (b_2^{(r)})_n \cdots (b_m^{(r)})_n} z^{mn+r}, \quad (3)$$

де $r = \overline{0, m-1}$, $n = 0, 1, \dots$, продовжується до ізоморфізму простору $\mathcal{H}(G)$.

При певних обмеженнях на параметри оператор T з теореми 3 можна зобразити у вигляді добутку інтегральних операторів.

Теорема 4. Нехай G — довільна зіркова відносно початку координат та m -симетрична область комплексної площини, а $c^{(r)}$, $a_j^{(r)}$, $b_j^{(r)}$, $r = \overline{0, m-1}$, $j = \overline{1, m}$, — довільні комплексні

числа, для яких виконуються умови: $\operatorname{Re}(a_j^{(r)} - r/m) > 0$, $\operatorname{Re}(b_j^{(r)} - a_j^{(r)}) > 0$, $r = \overline{0, m-1}$, $j = \overline{1, m}$. Тоді діагональний оператор T , який на степенях z визначається рівностями (3), формулою $A = A_1 A_2 \cdots A_m$, продовжується до ізоморфізму з класу $\mathcal{L}(\mathcal{H}(G))$.

Тут A_j , $j = \overline{1, m}$, — оператори з класу $\mathcal{L}(\mathcal{H}(G))$, які визначаються такими рівностями:

$$(A_j f)(z) = \sum_{r=0}^{m-1} \sum_{l=0}^{m-1} \omega^{-rl} c_{r,j} d_{r,j} \int_0^1 \tau^{ma_j^{(r)} - r - 1} (1 - \tau^m)^{b_j^{(r)} - a_j^{(r)} - 1} f(\omega^l z \tau) d\tau,$$

де $d_{r,j} = B^{-1}(a_j^{(r)}, b_j^{(r)} - a_j^{(r)})$, $j = \overline{1, m}$, $c_{r,1} = c^{(r)}$, $c_{r,j} = 1$, $j = \overline{2, m}$; $r = \overline{0, m-1}$. Тут символом $B(a_j^{(r)}, b_j^{(r)} - a_j^{(r)})$ позначено значення бета-функції Ейлера у відповідних точках.

Застосуємо одержані результати стосовно діагональних операторів до вивчення в просторі $\mathcal{H}(G)$ властивостей оператора виду

$$(\Lambda f)(z) = f'(z) + \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j \frac{f(\omega^j z) - f(0)}{z}, \quad (4)$$

де α_j , $j = \overline{0, m-1}$, — довільні комплексні числа, а G — довільна m -симетрична область комплексної площини, яка містить початок координат. Цей оператор є узагальненням оператора Данкла, який одержується з (4) при $m = 2$ та $\alpha_0 + \alpha_1 = 0$. Властивості оператора Данкла в просторах аналітичних функцій досліджувалися в працях [8, 11].

Вивчимо умови, при яких узагальнений оператор Данкла (4) є еквівалентним до оператора диференціювання в просторі $\mathcal{H}(G)$. Оператор Λ є оператором зваженого зсуву, причому $\Lambda z^n = \lambda_n z^{n-1}$, де $\lambda_0 = 0$ і $\lambda_n = n + \sum_{j=0}^{m-1} \lambda_j \omega^{jn}$, $n = 1, 2, \dots$

Теорема 5. *Нехай G — довільна зіркова відносно початку координат та m -симетрична область комплексної площини. Для того щоб оператор Λ був еквівалентним до оператора d/dz у просторі $\mathcal{H}(G)$, необхідно і достатньо, щоб $\lambda_n \neq 0$, $n = 1, 2, \dots$*

За допомогою теореми 5 можна одержати опис комутанта оператора Λ , а також встановити його гіперциклічність та хаотичність [10] у просторі $\mathcal{H}(G)$, подібно до того, як це зроблено в [11] для оператора Данкла.

При певних обмеженнях на параметри узагальненого оператора Данкла Λ оператор перетворення T оператора d/dz в оператор Λ можна зобразити у вигляді добутку інтегральних операторів. Нехай виконується умова

$$\operatorname{Re} \left(\sum_{k=0}^{m-1} \alpha_k \omega^{ks} \right) > 0, \quad s = \overline{0, m-1}. \quad (5)$$

Тоді оператор T_j , який визначається формулою

$$(T_j f)(z) = \sum_{r=0}^{m-1} \sum_{l=0}^{m-1} \omega^{-rl} t_{j,r} \int_0^1 \tau^{j-1} (1 - \tau^m)^{q(r+j)-1} f(\omega^l z \tau) d\tau, \quad (6)$$

де $t_{1,r} = r! / (\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_r) B^{-1}((r+1)/m, q(r+1))$ і $t_{j,r} = B^{-1}((r+j)/m, q(r+j))$ при $j = \overline{2, m}$, а $q(r+j) = \left(\sum_{k=0}^{m-1} \alpha_k \omega^{k(r+j)} \right) / m$, $r = \overline{0, m-1}$, $j = \overline{1, m}$, належить до класу $\mathcal{L}(\mathcal{H}(G))$.

Теорема 6. *Нехай G — довільна зіркова відносно початку координат та m -симетрична область комплексної площини, а комплексні числа α_j , $j = \overline{0, m-1}$, задовольняють умову (5). Тоді оператор $T = T_1 T_2 \cdots T_m$, де T_j , $j = \overline{1, m}$, визначаються рівностями (6), є ізоморфізмом простору $\mathcal{H}(G)$, для якого виконується рівність $Td/dz = \Lambda T$.*

1. *Deters I. N., Seubert S. M.* Cyclic vectors of diagonal operators on the space of functions analytic on a disk // *J. Math. Anal. Appl.* – 2007. – **334**, No 2. – P. 1209–1219.
2. *Линчук Н. Е.* Представление коммутантов оператора обобщенного интегрирования Гельфонда–Леонтьева // *Изв. вузов. Матем.* – 1985. – № 5. – С. 72–74.
3. *Линчук Н. Є., Линчук С. С.* Деякі властивості операторів узагальненого інтегрування Гельфонда–Леонтьєва // *Укр. мат. журн.* – 2011. – **63**, № 1. – С. 61–68.
4. *Linchuk S. S.* Diagonal operators in spaces of analytic functions and their applications // *Current problems in function theory.* – Rostov-on-Don: Rostov. Gos. Univ., 1987. – P. 118–121.
5. *Братищев А. В.* О линейных операторах, символ которых является функцией произведения своих аргументов // *Докл. РАН.* – 1999. – **365**, № 1. – С. 9–12.
6. *Müller J.* The Hadamard multiplication theorem and applications in summability theory // *Complex variabl. Theory Appl.* – 1992. – **18**. – P. 155–166.
7. *Dimovski I. H.* Convolutional calculus. – Dordrecht: Kluwer, 1990. – 208 p.
8. *Ben Salem N., Kallel S.* Integro-differential-difference equations associated with the Dunkl operator and entire functions // *Comment. Math. Univ. Carolin.* – 2004. – **45**, No 4. – P. 699–725.
9. *Betancor J. J., Sifi M., Trimeche K.* Hypercyclic and chaotic convolution operators associated with the Dunkl operator on \mathbb{C} // *Acta Math. Hungar.* – 2005. – **106**, No 1–2. – P. 101–116.
10. *Братищев А. В.* Хаотичность коммутирующих с дифференцированием Данкла преобразований пространства аналитических функций // *Вестн. ДГТУ.* – 2009. – **9**, № 2. – С. 196–207.
11. *Забирова К. Р., Напалков В. В.* Операторы свертки Данкла и их свойства // *Докл. РАН.* – 2013. – **449**, № 6. – С. 632–634.

Чернівецький національний університет
ім. Юрія Федьковича

Надійшло до редакції 12.09.2013

Ю. С. Линчук

Об одном классе диагональных операторов в пространствах аналитических функций и его применение

В пространствах функций, аналитических в произвольных областях, исследованы некоторые свойства диагональных операторов, порожденных тейлоровскими коэффициентами обобщенных гипергеометрических функций. Полученные результаты применены к изучению свойств обобщенного оператора Данкла.

Yu. S. Linchuk

On a class of diagonal operators in the spaces of analytic functions and its application

Diagonal operators induced by the Taylor coefficients of hypergeometric functions and some properties of such operators in the spaces of functions analytic in arbitrary domains are investigated. The results are applied to study properties of the generalized Dunkl operator.

Спектральний аналіз локально скінченних графів з одним нескінченним променем

(Представлено членом-кореспондентом НАН України Ю. С. Самойленком)

Проведено детальний спектральний аналіз злічених графів, які є об'єднанням скінченного графа та напівобмеженого нескінченного ланцюжка. Охарактеризовано спектр матриці суміжності таких графів, побудовано спектральну міру, наведено у явній формі власні вектори та спектральний розклад за власними векторами.

1. Постановка задачі. Спектральна теорія графів є одним із актуальних напрямів у сучасній математичній фізиці (див. [1–8] і цитовану там літературу). Це пов'язано як із внутрішніми стимулами розвитку теорії, так і з вирішенням конкретних прикладних задач, які виникають у теорії інформаційних, комунікаційних, енергетичних та транспортних мереж.

Простим неорієнтованим графом G називають пару (V, E) , у якій V — деяка непорожня множина (множина вершин), а E — множина, що складається з невпорядкованих пар різних вершин V (множина ребер). З графом G однозначно пов'язана матриця суміжності $A(G) = (a_{ij})_{i,j=1}^{\infty}$, елементи якої a_{ij} дорівнюють 1, якщо вершини з номерами i та j з'єднуються ребром, або — 0, якщо таке ребро відсутнє.

У випадку злічених графів матриця $A(G)$ породжує в гільбертовому просторі $l_2(V)$ самоспряжений оператор \mathbb{A} , спектр якого має дискретну $\sigma_p(\mathbb{A})$ та неперервну компоненту $\sigma_c(\mathbb{A})$. Під спектральним аналізом графа G розуміють спектральний аналіз самоспряженого оператора \mathbb{A} у гільбертовому просторі $l_2(V)$.

Метою даної роботи є проведення детального спектрального аналізу локально скінченних графів $G_{n,\infty}$, які утворені приєднанням до скінченних графів G_n напівобмеженого ланцюжка $A_{\mathbb{N}}$, вершини якого можна занумерувати всіма натуральними числами \mathbb{N} , а ребра з'єднують лише вершини з послідовними номерами.

Матриця суміжності $A(G_{n,\infty})$ графа $G_{n,\infty}$ породжує самоспряжений обмежений оператор \mathbb{A} , який діє в $l_2(\mathbb{N})$ як

$$\mathbb{A}x = \left(\sum_{i=1}^n a_{1i}x_i, \dots, \sum_{i=1}^n a_{(n-1)i}x_i, \sum_{i=1}^n a_{ni}x_i + x_{n+1}, x_n + x_{n+2}, \dots, x_{j-1} + x_{j+1}, \dots \right). \quad (1)$$

Тут скінченна симетрична матриця $A = (a_{ij})_{i,j=1}^n$ є матрицею суміжності графа G_n .

Матриця суміжності напівобмеженого ланцюжка $A_{\mathbb{N}}$ є якобієвою матрицею J_0 , у якій на головній діагоналі стоять нулі, а на двох побічних — одиниці. Добре відомо, що матриця J_0 породжує в просторі $l_2(\mathbb{N})$ самоспряжений оператор, спектр якого чисто абсолютно неперервний, однократний і утворює інтервал $[-2, 2]$ (див. [4, 9, 10]).

Більше того, для оператора J_0 у просторі $l_2(\mathbb{N})$ справедлива спектральна теорема про розклад за узагальненими власними функціями (див. [9]). Для кожного $\lambda \in [-2, 2]$ вектор-функція $\varphi_\lambda = (\varphi_{\lambda,1}, \varphi_{\lambda,2}, \dots)$, де $\varphi_{\lambda,j} = P_{j-1}(\lambda)$, $j \geq 1$, є узагальненою власною функцією оператора J_0 , що відповідає власному значенню λ , тобто $J_0\varphi_\lambda = \lambda\varphi_\lambda$.

Тут $P_j(\lambda)$ є поліномом степеня j від λ , що виражається у вигляді $P_j(\lambda) = U_j(\lambda/2)$ через поліноми Чебишова другого роду $U_j(z) = \sin((j+1)\arccos z)/\sin(\arccos z)$. Для поліномів $P_j(\lambda)$ вірне рекурентне співвідношення $P_{j+1}(\lambda) = \lambda P_j(\lambda) - P_{j-1}(\lambda)$ з початковими умовами $P_{-1}(\lambda) = 0$, $P_0(\lambda) = 1$, $P_1(\lambda) = \lambda$.

Кожному вектору $x \in l_2(\mathbb{N})$ відповідає його перетворення Фур'є $\widetilde{x}(\lambda)$ за узагальненим власним вектором

$$\widetilde{x}(\lambda) \equiv \mathfrak{F}x = (x, \varphi_\lambda) = \sum_{j=1}^{\infty} x_j \varphi_{\lambda,j}. \quad (2)$$

Функція $\widetilde{x}(\lambda)$ належить простору $L_2([-2, 2], \rho(\lambda)d\lambda) \equiv L_2(\rho)$ квадратично сумовних функцій на інтервалі $[-2, 2]$ з вагою $\rho(\lambda) = \sqrt{4 - \lambda^2}/2\pi \equiv \rho_0(\lambda)$.

Вірне обернене перетворення Фур'є, визначене на всьому $L_2(\rho)$

$$x \equiv \mathfrak{F}^{-1}x = \int_{-2}^2 \widetilde{x}(\lambda) \varphi_{\lambda} \rho(\lambda) d\lambda. \quad (3)$$

Для довільних $x, y \in l_2(\mathbb{N})$ справедлива рівність Парсеваля

$$(x, y)_{l_2} = (\widetilde{x}, \widetilde{y})_{L_2(\rho)}. \quad (4)$$

2. Повний граф. Якщо G_n — повний граф із n вершин (кожні дві вершини якого з'єднує ребро), то йому відповідає матриця суміжності, в якій всі елементи, крім діагональних, є 1, а на діагоналі стоять 0. Повний спектральний аналіз оператора вигляду (1) для повного графа дає така теорема.

Теорема 1. *Оператор \mathbb{A} вигляду (1), що відповідає повному графу з n вершин, до однієї з вершин якого приєднаний нескінченний промінь, є обмеженим самоспряженим оператором у $l_2(\mathbb{N})$. Спектр оператора містить дискретну та абсолютно неперервну компоненти.*

Дискретний спектр оператора \mathbb{A} при $n \geq 3$ складається з двох власних значень: $\sigma_p(\mathbb{A}) = \{-1$ кратності $n-2$; $\lambda_+\}$, де число λ_+ є додатним нулем квадратного полінома

$$p(\lambda) = (n-1)^2 + (n-2)^2 + (n-2)(n-3)\lambda - (n-2)\lambda^2. \quad (5)$$

Вектори, що мають вигляд $e_m = (0, 0, \dots, 1, -1, 0, \dots)$, де числа 1 та -1 стоять на місцях з номерами m та $m+1$, $m = 1, 2, \dots, n-2$, є власними векторами оператора \mathbb{A} , що відповідають власному значенню $\lambda = -1$ та утворюють $(n-2)$ -вимірний підпростір.

Власний вектор, що відповідає власному значенню λ_+ , має вигляд

$$e_+ = (\underbrace{(n-1)^{-1}, \dots, (n-1)^{-1}}_{n-1}, \mu, \mu^2, \dots),$$

де число $\mu = [\lambda_+ - (n-2)](n-1)^{-1}$.

Абсолютно неперервний спектр оператора \mathbb{A} утворює інтервал $[-2, 2]$. Для довільного $\lambda \in [-2, 2]$ узагальнений власний вектор оператора \mathbb{A} явно виражається через поліноми $P_j(\lambda)$:

$$\begin{aligned} \varphi_\lambda = & (\underbrace{P_0(\lambda), \dots, P_0(\lambda)}_{n-1}, P_1(\lambda) - (n-2)P_0(\lambda), P_2(\lambda) - (n-2)P_1(\lambda) - (n-2)P_0(\lambda), \\ & \dots, P_{j-n+1}(\lambda) - (n-2)P_{j-n}(\lambda) - (n-2)P_{j-n-1}(\lambda), \dots). \end{aligned} \quad (6)$$

Для векторів $x \in H_c = l_2(\mathbb{N}) \ominus H_p$, де H_p – підпростір, що містить усі власні вектори \mathbb{A} , перетворення Фур'є $x(\lambda)$ за узагальненими власними векторами, яке визначається (2), належить простору $L_2(\rho)$ зі спектральною щільністю

$$\rho(\lambda) = \frac{\sqrt{4 - \lambda^2}}{2\pi r(\lambda)}, \quad (7)$$

де поліном $r(\lambda)$ визначається рівністю (5).

Перетворення Фур'є \mathfrak{F} є ізометричним оператором із підпростору $H_c \subset l_2(\mathbb{N})$ у простір $L_2(\rho)$. Вірне обернене перетворення Фур'є (3), визначене на всьому $L_2(\rho)$. Для довільних $x, y \in H_c$ справедлива рівність Парсеваля (4).

Доведення випливає з явного вигляду оператора \mathbb{A} і наведених виразів для власних векторів. Враховуючи, що система поліномів $\{P_j\}_{j=0}^\infty$ утворює ортонормований базис у просторі $L_2(\rho_0)$, а вираз $(1 + \mu^2 - \mu\lambda)^{-1} = \sum_{m=0}^\infty \mu^m P_m(\lambda)$ є твірною для поліномів P_j , отримуємо вираз (7) для спектральної щільності аналогічно тому, як це зроблено для зіркових графів у роботі [11].

Приклад 1. При $n = 3$ граф $G_{3,\infty}$ має вигляд трикутника, до однієї вершини якого приєднаний промінь. Спектр такого графа містить два прості власні значення $\sigma_p = \{-1, \sqrt{5}\}$ і абсолютно неперервну компоненту $\sigma_{ac} = [-2, 2]$. Спектральна щільність визначається як $\rho(\lambda) = \sqrt{4 - \lambda^2}/(2\pi(5 - \lambda^2))$.

3. Загальний випадок. Розглянемо випадок $G_{n,\infty}$ графа, якому відповідає оператор \mathbb{A} виду (1).

Теорема 2. Для самоспряженого оператора \mathbb{A} вигляду (1) у просторі $l_2(\mathbb{N})$ власний вектор e_λ буде фінітним (у якого тільки скінченне число компонент відмінне від нуля) тоді й лише тоді, коли:

а) усі його компоненти $e_{\lambda,j} = 0$ при $j \geq n$;

б) ранг матриці $\widetilde{A}(\lambda)$, отриманої з $A - \lambda I$ шляхом відкидання останнього стовпчика, менший ніж $n - 1$;

в) вектор $\widehat{e}_\lambda = (e_{\lambda,1}, \dots, e_{\lambda,n-1})$ є нетривіальним розв'язком системи рівнянь

$$\widetilde{A}(\lambda)\widehat{e}_\lambda = 0. \quad (8)$$

Теорема 3. Для самоспряженого оператора \mathbb{A} вигляду (1) у просторі $l_2(\mathbb{N})$ власному значенню λ з умовою $|\lambda| > 2$ відповідає нефінітний власний вектор тоді й лише тоді, коли число λ є розв'язком системи рівнянь

$$\lambda = \mu + \mu^{-1}, \quad \mu^{-1} = \frac{\det(\lambda I - \widehat{A})}{\det(\lambda I - A)}, \quad (9)$$

де $|\mu| < 1$, а матриця \widehat{A} отримується із матриці A відкиданням останнього стовпчика і останнього рядка. З точністю до сталого множника нефінітний власний вектор має вигляд

$$e_\lambda = (e_{\lambda,1}, \dots, e_{\lambda,n-1}, \mu, \mu^2, \dots, \mu^k, \dots).$$

Вектор $\widetilde{e}_\lambda = (e_{\lambda,1}, \dots, e_{\lambda,n-1}, \mu)$ є розв'язком рівняння

$$(A - \lambda I)\widetilde{e}_\lambda + \mu^2 e_n = 0, \quad (10)$$

де $e_n = (0, \dots, 0, 1)$ – n -вимірний вектор.

Нехай поліном $r(\lambda)$ з коефіцієнтом, що дорівнює 1, при старшому степені λ є найбільшим спільним дільником $\det(\lambda I - A) = a(\lambda)r(\lambda)$ та $\det(\lambda I - \widehat{A}) = a(\lambda)r(\lambda)$, тоді, підставляючи $\mu^{-1} = \widehat{a}a^{-1}$ у рівність $\lambda = \mu + \mu^{-1}$, отримуємо, що множина власних значень λ оператора \mathbb{A} вигляду (1), які відповідають нефінітним власним векторам, є множиною дійсних нулів полінома

$$p(\lambda) = \widehat{a}(\lambda)^2 + a(\lambda)^2 - \lambda \widehat{a}(\lambda)a(\lambda), \quad (11)$$

які за модулем більші, ніж 2, і для яких $\mu = \widehat{a}a^{-1}$ за модулем менші, ніж 1. Поліном (11) будемо називати спектральним для графа $G_{n,\infty}$. У спектрального полінома усі дійсні нулі прості і за модулем не менші, ніж 2.

Теорема 4. Для $\lambda \in [-2, 2]$ існує і єдина вектор-функція $\varphi_\lambda = (\varphi_{\lambda,0}, \varphi_{\lambda,1}, \dots)$, яка є узагальненим власним вектором для оператора \mathbb{A} з власним значенням λ , і така, що всі її компоненти є поліномами від λ та задовольняють умови:

- 1) вектор φ_λ ортогональний усім фінітним власним векторам оператора \mathbb{A} ;
- 2) $\varphi_{\lambda,n} = \widehat{a}(\lambda)$, $\varphi_{\lambda,n+1} = a(\lambda)$;
- 3) існують і єдині числа $\gamma_1, \dots, \gamma_k$ ($\gamma_k \neq 0$) такі, що при $j \geq 2n + 2$

$$\varphi_{\lambda,j} = P_j(\lambda) + \sum_{l=1}^k \gamma_l P_{j-l}(\lambda). \quad (12)$$

Теорема 5. Нехай H_c – підпростір простору $l_2(V)$, який складається з векторів, ортогональних до всіх власних векторів самоспряженого оператора \mathbb{A} вигляду (1). Тоді справедливі розклади векторів $x \in H_c$ за узагальненими власними векторами φ_λ , тобто вірні рівності (2)–(4), де спектральна щільність $\rho(\lambda)$ визначається через поліноми $p(\lambda)$ у вигляді (7).

Доведення теорем 2–5 використовує явний вигляд (1) оператора \mathbb{A} і той факт, що компоненти звичайних і узагальнених власних векторів задовольняють просте різницеве рівняння $\psi_{j-1} + \psi_{j+1} = \lambda\psi_j$ при $j \geq n$. Дане рівняння має два лінійно незалежні розв'язки $\psi_j = \mu^{\pm j}$ при $|\lambda| > 2$, де $\mu + \mu^{-1} = \lambda$, або $\psi_j = P_j(\lambda)$, $\psi_j = P_{j+1}(\lambda)$ при $|\lambda| \leq 2$. Крім того, можна показати, що матриця суміжності графа $G_{n,\infty}$ унітарно еквівалентна ортогональній сумі скінченної симетричної матриці і якобієвої матриці J , у якій лише скінченне число елементів відмінні від відповідних елементів матриці J_0 . Це дає можливість використати спектральну теорію якобієвих матриць [9, 10] і приводить до рівностей (2)–(4) у підпросторі H_c з деякою спектральною щільністю $\rho(\lambda)$. Зв'язок (7) спектральної щільності $\rho(\lambda)$ зі спектральним поліномом $p(\lambda)$ впливає із явного вигляду (12) для узагальнених власних векторів.

4. Циклічний граф. Розглянемо граф $C_{n,\infty}$, що утворений приєднанням нескінченного променя до однієї вершини циклічного графа C_n із n послідовно занумерованих вершин. Оператор \mathbb{A} , який відповідає матриці суміжності $A(C_{n,\infty})$, діє так:

$$\mathbb{A}x = (x_2 + x_n, x_1 + x_3, \dots, x_{n-2} + x_n, x_1 + x_{n-1}, \dots, x_{j-1} + x_{j+1}, \dots). \quad (13)$$

Теорема 6. Оператор \mathbb{A} вигляду (13), що відповідає циклічному графу $C_{n,\infty}$ з n вершин, до однієї з вершин якого приєднаний нескінченний промінь, є обмеженим самоспряженим оператором у $l_2(\mathbb{N})$.

Дискретний спектр оператора \mathbb{A} , якому відповідають фінітні власні значення, має вигляд:

$$\sigma_p(\mathbb{A}) = \left\{ \lambda_k = 2 \cos \frac{2\pi k}{n}, k = 0, 1, \dots, \left[\frac{n}{2} \right] - 1 \right\}.$$

Абсолютно неперервна компонента спектра оператора \mathbb{A} утворює інтервал $[-2, 2]$. Спектральна щільність $\rho(\lambda)$ визначається рівністю (7), у якій спектральний поліном має вигляд (11), де $\widehat{a(\lambda)} = P_{n-1}(\lambda)/r(\lambda)$, $a(\lambda) = (P_n(\lambda) - P_{n-2}(\lambda) - 2)/r(\lambda)$, $a r(\lambda) = \prod_{k=1}^{\lfloor n/2 \rfloor - 1} (\lambda - \lambda_k)$.

Приклад 2. У випадку, коли нескінченний промінь приєднаний до циклічного графа із 4 вершин, оператор \mathbb{A} має фінітний власний вектор $e_0 = (0, 1, -1, 0, 0, 0, \dots)$ з власним значенням $\lambda = 0$, два нефінітні власні вектори $e_{\pm} = ((1/\sqrt{2})\mu_{\pm}, 1/2, 1/2, \mu_{\pm}, \mu_{\pm}^2, \dots)$, що відповідають власним значенням $\lambda_{\pm} = \pm\sqrt{2+2\sqrt{2}}$, де числа $\mu_{\pm} = \pm\sqrt{\sqrt{2}-1}$ пов'язані з λ_{\pm} співвідношеннями $\mu_{\pm} = \sqrt{2}\lambda_{\pm}^{-1}$. Власні значення λ_{\pm} є нулями спектрального полінома $p(\lambda) = 4 + 4\lambda^2 - \lambda^4$.

Кожному $\lambda \in [-2, 2]$ відповідає узагальнений власний вектор

$$\varphi_{\lambda} = (2P_0(\lambda), P_1(\lambda), P_1(\lambda), P_2(\lambda) - P_0(\lambda), P_3(\lambda) - 2P_1(\lambda), P_4(\lambda) - 2P_2(\lambda) - P_0(\lambda), \dots, P_{j-2}(\lambda) - 2P_{j-4}(\lambda) - P_{j-6}(\lambda), \dots). \quad (14)$$

Для векторів $x \in H_c \subset l_2(\mathbb{N})$ справедливі розклади (2), (3) за узагальненим власним вектором φ_{λ} вигляду (14).

5. T-подібні графи. Розглянемо граф $T_{p,q,\infty}$, утворений приєднанням променя $A_{\mathbb{N}}$ до вершини, що ділить ланцюжок на дві частини із p та q ребрами. Оскільки характеристичний многочлен $\det(\lambda I - A_m)$ матриці A_m простого ланцюга із m вершин виражається через поліном $P_m(\lambda)$, а характеристичний многочлен незв'язного графа є добуток характеристичних многочленів матриць суміжності кожної з компонент незв'язного графа, то для $T_{p,q,\infty}$ -графа

$$\det(\lambda I - \widehat{A}) = P_p(\lambda)P_q(\lambda), \quad \det(\lambda I - A) = P_{p+q+1}(\lambda). \quad (15)$$

У випадку, коли $p = q$, тобто у T -графа рівні плечі, взаємно прості поліноми $\widehat{a(\lambda)}$ і $a(\lambda)$ мають вигляд

$$\widehat{a(\lambda)} = P_q(\lambda), \quad a(\lambda) = P_{q+1}(\lambda) - P_{q-1}(\lambda). \quad (16)$$

Тому спектральний поліном графа $T_{q,q,\infty}$ із (11) з урахуванням (16) має вигляд

$$p(\lambda) = P_q(\lambda)^2 + 2P_{q-1}(\lambda)^2 - 2P_{q+1}(\lambda)P_{q-1}(\lambda).$$

Оскільки нулями полінома $P_m(\lambda)$ є числа $\lambda_k = 2 \cos(\pi k / (2(m+1)))$ ($k = 1, 2, \dots, m$), то взаємно прості поліноми $\widehat{a(\lambda)}$ і $a(\lambda)$ для випадку (15) знаходяться явно. Зокрема, у випадку, коли числа $p+1$ і $q+1$ взаємно прості, $\widehat{a(\lambda)} = P_p(\lambda)P_q(\lambda)$, а $a(\lambda) = P_{p+q+1}(\lambda)$ і спектральний поліном має вигляд

$$p(\lambda) = P_{p+q+1}(\lambda)[P_{p+q+1}(\lambda) - \lambda P_p(\lambda)P_q(\lambda)] + P_p(\lambda)^2 P_q(\lambda)^2.$$

6. Зіркові графи. Розглянемо зірковий граф $S_{\vec{k},\infty}$, $\vec{k} = (k_1, k_2, \dots, k_n)$ з одним нескінченним променем, що приєднаний до центра зіркового графа $S_{\vec{k}}$ з ланцюговими променями, які містять відповідно k_1, k_2, \dots, k_n вершин і виходять із центра зіркового графа. У цьому випадку можна у явному вигляді провести повний спектральний аналіз такого графа, виходячи із загальних теорем, наведених у п. 3. Дійсно, характеристичний многочлен матриці суміжності графа $S_{\vec{k}}$ явно виражається через поліноми $P_j(\lambda)$ у вигляді $\det(\lambda I - A) = \lambda P_{k_1}(\lambda) \cdots P_{k_n}(\lambda) - \sum_{j=1}^n [P_{k_1}(\lambda) \cdots P_{k_{j-1}}(\lambda) \cdots P_{k_n}(\lambda)]$. Характеристичний многочлен

зіркового графа $S_{\tilde{k}}$ з вилученим центром має вигляд $\det(\lambda I - \tilde{A}) = P_{k_1}(\lambda)P_{k_2}(\lambda) \cdots P_{k_n}(\lambda)$. Тоді спектральний поліном зіркового графа $S_{\tilde{k}, \infty}$ визначається рівністю (11). У випадку, коли всі скінченні промені містять однакову кількість вершин, тобто $k_1 = k_2 = \cdots = k_n = k$, $r(\lambda) = P_k(\lambda)^{n-1}$ і спектральний поліном має вигляд

$$p(\lambda) = P_k(\lambda)^2 + n^2 P_{k-1}(\lambda)^2 - \lambda n P_k(\lambda) P_{k-1}(\lambda).$$

Цей вираз у випадку $k = 1$ тотожний розглянутому в роботі [11] $p(\lambda) = n^2 - (n - 1)\lambda^2$. При $k = 2$ спектральний поліном має вигляд $p(\lambda) = 1 + (n^2 + n - 2)\lambda^2 - (n - 1)\lambda^4$.

Роботу виконано в рамках проекту 03-01-12 "Обернені задачі в сучасній математичній фізиці" спільних проектів НАН України та Сибірського відділення РАН.

Автори висловлюють щире подяку Ю. С. Самойленку за конструктивні зауваження.

1. Цветкович Д., Дуб М., Захс Х. Спектры графов. Теория и применение. – Киев: Наук. думка, 1984. – 384 с.
2. Москалева Ю. П., Самойленко Ю. С. Введение в спектральную теорию графов. – Киев: Центр учеб. лит., 2007. – 114 с.
3. Brouwer A. E., Haemers W. H. Spectra of graphs. – New York: Springer, 2012. – 250 с.
4. Mohar B. The spectrum of an infinite graph // Linear Algebra Appl. – 1982. – **48**. – P. 245–256.
5. Mohar B., Woess W. A survey on spectra of infinite graphs // Bull. London Math. Soc. – 1989. – **21**. – P. 209–234.
6. Mantoiu M., Richard S., Tiedra de Aldecoa R. Spectral analysis for adjacency operators on graphs // arXiv:math-ph/0603020v1 7 Mar 2006.
7. von Below J. An index theory for uniformly locally finite graphs // Linear Algebra Appl. – 2009. – **431**. – P. 1–19.
8. Покорный Ю. В., Пенкин О. М., Прядиев В. Л. и др. Дифференциальные уравнения на геометрических графах. – Москва: Физматлит, 2004. – 272 с.
9. Березанский Ю. М. Разложение по собственным функциям самосопряженных операторов. – Киев: Наук. думка, 1965. – 798 с.
10. Simon B. Szego's theorem and its descendants: Spectral theory for L_2 perturbations of orthogonal polynomials. – Princeton, NY: Princeton Univ. Press, 2011. – 650 p.
11. Лебідь В. О., Нижник Л. П. Спектральний аналіз зіркового графа з одним нескінченним променем // Наук. зап. НаУКМА. – 2013. – **139**. – С. 18–22.

Інститут математики НАН України, Київ

Надійшло до редакції 18.09.2013

В. А. Лебедь, Л. П. Нижник

Спектральный анализ локально конечных графов с одним бесконечным лучом

Проведен детальний спектральний аналіз счетных графов, которые являются объединением конечного графа и полуограниченной бесконечной цепочки. Охарактеризован спектр матрицы смежности таких графов, построена спектральная мера, приведены в явной форме собственные векторы и спектральное разложение по собственным векторам.

V. O. Lebid, L. P. Nizhnik

Spectral analysis of locally finite graphs with one infinite ray

A complete spectral analysis of countable graphs defined as the union of a finite graph and a semibounded infinite chain is given. The spectrum of the adjacency matrix of graphs is defined, a spectral measure is constructed, the eigenvectors and the spectral expansion in eigenvectors are presented.

V. V. Kurta

A Liouville comparison principle for solutions to semilinear parabolic second-order partial differential inequalities in the whole space

(Presented by Corresponding Member of the NAS of Ukraine V. Ya. Gutlyanskii)

We obtain a new Liouville comparison principle for weak solutions (u, v) to semilinear parabolic second-order partial differential inequalities of the form

$$u_t - \mathcal{L}u - |u|^{q-1}u \geq v_t - \mathcal{L}v - |v|^{q-1}v \quad (*)$$

in the whole space $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$. Here, $n \geq 1$, $q > 1$, and

$$\mathcal{L} = \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left[a_{ij}(t, x) \frac{\partial}{\partial x_j} \right],$$

where $a_{ij}(t, x)$, $i, j = 1, \dots, n$, are functions that are defined, measurable, and locally bounded in $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ and such that $a_{ij}(t, x) = a_{ji}(t, x)$ and

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(t, x) \xi_i \xi_j \geq 0$$

for almost all $(t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ and all $\xi \in \mathbb{R}^n$. We show that the critical exponents in the Liouville comparison principle obtained, which are responsible for the non-existence of non-trivial (i. e., such that $u \not\equiv v$) weak solutions to $(*)$ in the whole space $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$, depend on the behavior of the coefficients of the operator \mathcal{L} at infinity and coincide with those obtained for solutions of $(*)$ in the half-space $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^n$. As direct corollaries, we obtain new Liouville-type theorems for non-negative weak solutions u $(*)$ in the whole space $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ in the case where $v \equiv 0$. All the results obtained are new and sharp.

Introduction and preliminaries. This work may be considered as a supplement to paper [1] and is devoted to a new Liouville comparison principle for weak solutions to parabolic inequalities of the form

$$u_t - \mathcal{L}u - |u|^{q-1}u \geq v_t - \mathcal{L}v - |v|^{q-1}v \quad (1)$$

in the whole space $\mathbb{E} = \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$, where $n \geq 1$ is a natural number, $q > 1$ is a real number, and \mathcal{L} is a linear second-order partial differential operator in the divergence form defined by the relation

$$\mathcal{L} = \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left[a_{ij}(t, x) \frac{\partial}{\partial x_j} \right] \quad (2)$$

for all $(t, x) \in \mathbb{E}$. We assume that the coefficients $a_{ij}(t, x)$, $i, j = 1, \dots, n$, of the operator \mathcal{L} are functions that are defined, measurable, and locally bounded in \mathbb{E} . We also assume that

$a_{ij}(t, x) = a_{ji}(t, x)$, $i, j = 1, \dots, n$, for almost all $(t, x) \in \mathbb{E}$, and the corresponding quadratic form satisfies the conditions

$$0 \leq \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(t, x) \xi_i \xi_j \leq A(t, x) |\xi|^2$$

for all $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in \mathbb{R}^n$ and almost all $(t, x) \in \mathbb{E}$, where $A(t, x)$ is a function that is defined, measurable, non-negative, and locally bounded in \mathbb{E} .

It is worth to note that if $u = u(t, x)$ satisfies the inequality

$$u_t \geq \mathcal{L}u + |u|^{q-1}u, \tag{3}$$

and $v = v(t, x)$ satisfies the inequality

$$v_t \leq \mathcal{L}v + |v|^{q-1}v, \tag{4}$$

then the pair (u, v) satisfies inequality (1). Thus, all the results obtained in this paper for solutions to (1) are valid for the corresponding solutions to inequalities (3) and (4).

The results obtained in [1] for solutions to inequality (1) in the half-space $\mathbb{S} = (0, +\infty) \times \mathbb{R}^n$, $n \geq 1$, show that the behavior of the coefficients $a_{ij}(t, x)$ of the operator \mathcal{L} as $|x| \rightarrow +\infty$ manifests itself in Liouville-type results; namely, the critical exponents in the Liouville comparison principle for weak solutions to (1) in the half-space \mathbb{S} , which are responsible for the non-existence of non-trivial (i. e., such that $u \not\equiv v$) weak solutions to inequality (1) in \mathbb{S} , depend essentially on the behavior of the coefficients of the operator \mathcal{L} as $|x| \rightarrow +\infty$.

The main goal of the present work is to show that similar critical exponents in the Liouville comparison principle for weak solutions to (1) in the whole space \mathbb{E} also exist and, what is more intriguing, coincide with those obtained in [1] for solutions to (1) in the half-space \mathbb{S} . In this connection, it is important to note that the latter, generally speaking, is not the case for solutions to the equations corresponding to inequalities (1), (3), and (4). To make certain of this, it is enough to compare the famous Fujita critical blow-up exponent $q_F = 1 + 2/n$ for non-negative classical solutions to the equation

$$u_t = \Delta u + |u|^{q-1}u \tag{5}$$

in the half-space \mathbb{S} obtained in [2–4] with the blow-up exponent for non-negative classical solutions to equation (5) in the whole space \mathbb{E} obtained in [5, 6], which is equal to

$$q_B = \begin{cases} \frac{n(n+2)}{(n-1)^2}, & \text{if } n \geq 2, \\ +\infty, & \text{if } n = 1. \end{cases}$$

In order to trace the relation between the behavior of the coefficients $a_{ij}(t, x)$ of the operator \mathcal{L} as $|x| \rightarrow +\infty$ and the critical exponents that are responsible for the non-existence of non-trivial weak solutions to inequality (1) in the whole space \mathbb{E} , we consider the quantity

$$\mathcal{A}(R) = \text{ess sup}_{(t,x) \in (-\infty, +\infty) \times \{R/2 < |x| < R\}} A(t, x)$$

for any $R > 0$ and assume that the coefficients of the operator \mathcal{L} satisfy the condition

$$\mathcal{A}(R) \leq cR^{2-\alpha} \tag{6}$$

with some real constant α and some real positive constant c , for all $R > 1$. It is clear that if $\alpha < 2$, then the coefficients of the operator \mathcal{L} may be unbounded in \mathbb{E} ; if $\alpha = 2$, they are globally bounded in \mathbb{E} ; and if $\alpha > 2$, they must vanish as $|x| \rightarrow +\infty$.

We also introduce a special function space $W^{\mathcal{L},q}(\mathbb{E})$, which is directly associated with the linear partial differential operator $\mathcal{P} = \partial/\partial t - \mathcal{L}$, and assume that the weak solutions to inequalities (1), (3), and (4) belong to this space only locally in \mathbb{E} .

Definition 1. Let $n \geq 1$ and $q > 1$, let \mathcal{L} be a differential operator defined by (2) in the whole space \mathbb{E} , and let Ω be an arbitrary domain in \mathbb{E} . By $W^{\mathcal{L},q}(\Omega)$, we denote the completion of the function space $C^\infty(\Omega)$ with respect to the norm

$$\|w\|_{W^{\mathcal{L},q}(\Omega)} = \int_{\Omega} |w_t| dt dx + \left[\int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(t,x) \frac{\partial w}{\partial x_i} \frac{\partial w}{\partial x_j} dt dx \right]^{1/2} + \left[\int_{\Omega} |w|^q dt dx \right]^{1/q},$$

where $C^\infty(\Omega)$ is the space of all functions defined and infinitely differentiable in Ω .

Definition 2. Let $n \geq 1$ and $q > 1$, and let \mathcal{L} be a differential operator defined by (2) in the whole space \mathbb{E} . A function $w = w(t,x)$ belongs to the function space $W_{\text{loc}}^{\mathcal{L},q}(\mathbb{E})$ if w belongs to $W^{\mathcal{L},q}(\Omega)$ for any bounded domain Ω in \mathbb{E} .

Definition 3. Let $n \geq 1$ and $q > 1$, and let \mathcal{L} be a differential operator defined by (2) in the whole space \mathbb{E} . A pair (u,v) of functions $u = u(t,x)$ and $v = v(t,x)$ is called a weak solution to inequality (1) in \mathbb{E} , if these functions are defined and measurable in \mathbb{E} , belong to the function space $W_{\text{loc}}^{\mathcal{L},q}(\mathbb{E})$, and satisfy the integral inequality

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{E}} \left[u_t \varphi + \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(t,x) \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_j} - |u|^{q-1} u \varphi \right] dt dx &\geq \\ &\geq \int_{\mathbb{E}} \left[v_t \varphi + \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(t,x) \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \frac{\partial v}{\partial x_j} - |v|^{q-1} v \varphi \right] dt dx \end{aligned} \quad (7)$$

for every function $\varphi \in C^\infty(\mathbb{E})$ with compact support in \mathbb{E} , where $C^\infty(\mathbb{S})$ is the space of all functions defined and infinitely differentiable in \mathbb{E} .

Remark 1. We understand inequality (7) in the meaning discussed, e. g., in [7].

Analogous definitions of the solutions to inequality (3) and inequality (4) in \mathbb{E} , as special cases of inequality (1) in \mathbb{E} for $v \equiv 0$ or $u \equiv 0$, follow immediately from Definition 3.

Theorem 1. Let $n \geq 1$, $\alpha > 0$, and $1 < q \leq 1 + \alpha/n$, let \mathcal{L} be a differential operator defined by (2) in the whole space \mathbb{E} , whose coefficients satisfy condition (6) with the given α and some $c > 0$, and let (u,v) be a weak solution to inequality (1) in \mathbb{E} such that $u \geq v$. Then $u = v$ in \mathbb{E} .

As we have observed above, since any pair of solutions $u = u(t,x)$, $v = v(t,x)$ to inequalities (3) and (4) in \mathbb{E} is a solution (u,v) to inequality (1) in \mathbb{E} , the following statement is a direct corollary of Theorem 1.

Theorem 2. Let $n \geq 1$, $\alpha > 0$, and $1 < q \leq 1 + \alpha/n$, let \mathcal{L} be a differential operator defined by (2) in the whole space \mathbb{E} , whose coefficients satisfy condition (6) with the given α and some $c > 0$, let $u = u(t,x)$ be a weak solution to inequality (3), and let $v = v(t,x)$ be a weak solution to inequality (4) in \mathbb{E} such that $u \geq v$. Then $u = v$ in \mathbb{E} .

Each of the results in Theorems 1 and 2, which obviously have the character of a comparison principle, we term a Liouville-type comparison principle, since, in particular cases where either

$u \equiv 0$ or $v \equiv 0$, it becomes a Liouville-type theorem for solutions to (4) or (3), respectively. We formulate here only the case where $v \equiv 0$.

Theorem 3. *Let $n \geq 1$, $\alpha > 0$, and $1 < q \leq 1 + \alpha/n$, let \mathcal{L} be a differential operator defined by (2) in the whole space \mathbb{E} , whose coefficients satisfy condition (6) with the given α and some $c > 0$, and let $u = u(t, x)$ be a non-negative weak solution to inequality (3) in \mathbb{E} . Then $u = 0$ in \mathbb{E} .*

Note that all the results in Theorems 1–3, including the partial case where \mathcal{L} is the Laplacian operator, are new and sharp. (We demonstrate their sharpness below by Examples 1–2). Thus, as we have already mentioned above, the critical exponents in Theorems 1–3, which are responsible for the non-existence of non-trivial weak solutions to inequalities (1), (3), and (4) in the whole space \mathbb{E} , coincide with those obtained in Theorems 1–3 in [1] for weak solutions to the corresponding inequalities in the half-space \mathbb{S} . In the particular case where $\alpha = 2$, the critical exponent in Theorems 1–3 coincides with the well-known Fujita critical blow-up exponent obtained in [2–4].

Example 1. Let $n \geq 1$, $\alpha > 0$, and $q > 1 + \alpha/n$. Consider the operator \mathcal{L} defined by (2) in the whole space \mathbb{E} with the coefficients given by the expression

$$a_{ij}(t, x) = (1 + |x|^2)^{(2-\alpha)/2} \delta_{ij} \quad (8)$$

for all $(t, x) \in \mathbb{E}$, where δ_{ij} are Kronecker's symbols, and $i, j = 1, \dots, n$. It is easy to see that condition (6) is fulfilled for these coefficients with the given α and some $c > 0$. Further, for the given α , let

$$u(t, x) = \begin{cases} \kappa t^{-\beta} \mathcal{E}(t, x), & \text{if } t > 0, \quad x \in \mathbb{R}^n, \\ 0, & \text{if } t \leq 0, \quad x \in \mathbb{R}^n, \end{cases} \quad (9)$$

where $\mathcal{E}(t, x) = \exp(-\gamma(1 + |x|^2)^{\alpha/2}/t)$ for all $t > 0$ and $x \in \mathbb{R}^n$, and the positive constants β , γ , and κ will be chosen below.

First, since the function $u = u(t, x)$ of the form (9) with any fixed positive constants α , β , γ , and κ is infinitely differentiable in the whole space \mathbb{E} and vanishes, along with all its derivatives, for all $t \leq 0$ and $x \in \mathbb{R}^n$, it is clear that $u = u(t, x)$ is a classical solution to inequality (3) for all $t \leq 0$ and $x \in \mathbb{R}^n$.

Now, consider the case where $t > 0$ and $x \in \mathbb{R}^n$. Making necessary calculations, we have

$$u_t = -\kappa\beta t^{-\beta-1} \mathcal{E}(t, x) + \kappa\gamma t^{-\beta-2} (1 + |x|^2)^{\alpha/2} \mathcal{E}(t, x),$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = -\alpha\kappa\gamma t^{-\beta-1} (1 + |x|^2)^{\alpha/2-1} \mathcal{E}(t, x) x_i$$

and

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ii}(t, x) \frac{\partial u}{\partial x_i} \right) = -\alpha\kappa\gamma t^{-\beta-1} \mathcal{E}(t, x) + \alpha^2 \kappa \gamma^2 t^{-\beta-2} (1 + |x|^2)^{\alpha/2} \frac{x_i^2}{1 + |x|^2} \mathcal{E}(t, x)$$

for all $t > 0$ and $x \in \mathbb{R}^n$, where the coefficients $a_{ii}(t, x)$ are given by (8), and $i = 1, \dots, n$. Further, it is also easy to calculate that

$$u_t - \mathcal{L}u = (\alpha\kappa n\gamma - \kappa\beta) t^{-\beta-1} \mathcal{E}(t, x) + \left(\kappa\gamma - \alpha^2 \kappa \gamma^2 \frac{|x|^2}{1 + |x|^2} \right) t^{-\beta-2} (1 + |x|^2)^{\alpha/2} \mathcal{E}(t, x)$$

and

$$|u|^{q-1} u = \kappa^q t^{-\beta q} \mathcal{E}^q(t, x).$$

As a result, inequality (3) with $u = u(t, x)$ given by (9) takes the form

$$(\alpha\kappa n\gamma - \kappa\beta)t^{-\beta-1}\mathcal{E}(t, x) + \left(\kappa\gamma - \alpha^2\kappa\gamma^2\frac{|x|^2}{1+|x|^2}\right)t^{-\beta-2}(1+|x|^2)^{\alpha/2}\mathcal{E}(t, x) \geq \kappa^qt^{-\beta q}\mathcal{E}^q(t, x) \quad (10)$$

for all $t > 0$ and $x \in \mathbb{R}^n$. Now, choosing the constants β , γ , and κ such that

$$\beta = \frac{1}{q-1}, \quad \frac{1}{\alpha n(q-1)} < \gamma \leq \left(\frac{1}{\alpha}\right)^2, \quad 0 < \kappa \leq \left(\alpha n\left(\gamma - \frac{1}{\alpha n(q-1)}\right)\right)^{1/(q-1)} \quad (11)$$

and taking into account that $\mathcal{E}(t, x) \leq 1$ for all $t > 0$ and $x \in \mathbb{R}^n$, it is not difficult to verify that inequality (10) holds for all $t > 0$ and $x \in \mathbb{R}^n$. Therefore, a function $u = u(t, x)$ of the form (9) with the given α and q and with the constants β , γ , and κ satisfying conditions (11) is a positive classical solution to inequality (3) for all $t > 0$ and $x \in \mathbb{R}^n$.

Thus, we may conclude that the function $u = u(t, x)$ of the form (9) with the given α and q and with the constants β , γ , and κ satisfying conditions (11) is indeed a non-trivial non-negative classical solution to inequality (3) in the whole space \mathbb{E} with $a_{ij}(t, x)$ that are the coefficients of the operator \mathcal{L} defined by (8). It is clear that the function $v = -u(t, x)$ is a non-trivial non-positive classical solution to inequality (4) in the whole space \mathbb{E} with $a_{ij}(t, x)$ in (2) defined by (8). Thus, the pair of functions $u = u(t, x)$ and $v = v(t, x)$ is a non-trivial classical solution to system (3), (4), and, therefore, (u, v) is a non-trivial classical solution to inequality (1) in the whole space \mathbb{E} such that $u(t, x) \geq v(t, x)$, with $a_{ij}(t, x)$ in (2) defined by (8).

Note that the non-negative classical supersolutions to linear uniformly parabolic equations with globally bounded coefficients in the non-divergence form in the whole space \mathbb{E} except the origin of coordinates in a form close to that given by relation (9) with $\alpha = 2$ were constructed in [8, p. 122]. Note also that the positive classical supersolutions to equation (5) in the half-space \mathbb{S} in a form close to that given by relation (9) with $\alpha = 2$ were constructed in [9, p. 283].

Example 2. Let $n \geq 1$, $\alpha \leq 0$, $q > 1 + \alpha/n$, and $q > 1$, and let $\hat{\alpha}$ be any positive number such that $q > 1 + \hat{\alpha}/n$. Consider the operator \mathcal{L} defined by (2) in the whole space \mathbb{E} with the coefficients given by the relation

$$a_{ij}(t, x) = (1 + |x|^2)^{(2-\hat{\alpha})/2}\delta_{ij} \quad (12)$$

for all $(t, x) \in \mathbb{E}$, where δ_{ij} are Kronecker's symbols, $i, j = 1, \dots, n$. As in Example 2, it is easy to see that $\mathcal{A}(R) \leq CR^{2-\hat{\alpha}}$ for all $R > 1$, where C is some positive constant which depends, possibly, on $\hat{\alpha}$ and n . Therefore, condition (6) is fulfilled for these coefficients with the given α and some $c > 0$. For the given $\hat{\alpha}$ and q , let $\beta = 1/(q-1)$, $1/(\hat{\alpha}n(q-1)) < \gamma \leq 1/\hat{\alpha}^2$, $0 < \kappa \leq (\hat{\alpha}n(\gamma - 1/(\hat{\alpha}n(q-1))))^{1/(q-1)}$, and

$$u(t, x) = \begin{cases} \kappa t^{-\beta} \exp\left(-\gamma\frac{(1+|x|^2)^{\hat{\alpha}/2}}{t}\right), & \text{if } t > 0, \quad x \in \mathbb{R}^n, \\ 0, & \text{if } t \leq 0, \quad x \in \mathbb{R}^n. \end{cases} \quad (13)$$

Again, as in Example 2, it is not difficult to verify that the function $u = u(t, x)$ defined by expression (13) is a nontrivial non-negative classical solution to inequality (3) in the whole space \mathbb{E} with $a_{ij}(t, x)$ in (2) defined by (12). It is clear that the function $v = -u(t, x)$ is a

nontrivial non-positive classical solution to inequality (4) in the whole space \mathbb{E} with $a_{ij}(t, x)$ defined by (12). Thus, the pair of functions $u = u(t, x)$ and $v = v(t, x)$ is a non-trivial classical solution to system (3), (4), and, therefore, (u, v) is a non-trivial classical solution to inequality (1) in the whole space \mathbb{E} such that $u(t, x) \geq v(t, x)$ with $a_{ij}(t, x)$ in (2) defined by (12).

Note that Examples 1–2 are constructed on the basis of those in [1].

1. Kurta V. V. A Liouville comparison principle for solutions of semilinear parabolic second-order partial differential inequalities // Asymptotic Analysis. – 2013. – **83**. – P. 83–99.
2. Fujita H. On the blowing up of solutions of the Cauchy problem for $u_t = \Delta u + u^{1+\alpha}$ // J. Fac. Sci. Univ. Tokyo, Sect. I. – 1966. – **13**. – P. 109–124.
3. Hayakawa K. On nonexistence of global solutions of some semilinear parabolic differential equations // Proc. Japan Acad. – 1973. – **49**. – P. 503–505.
4. Kobayashi K., Sirao T., Tanaka H. On the growing up problem for semilinear heat equations // J. Math. Soc. Japan. – 1977. – **29**, No 3. – P. 407–424.
5. Bidaut-Véron M.-F. Initial blow-up for the solutions of a semilinear parabolic equation with source term // Équations aux Dérivées Partielles et Applications. – Paris: Gauthier-Villars, 1998. – P. 189–198.
6. Poláčik P., Quittner P., Souplet Ph. Singularity and decay estimates in superlinear problems via Liouville-type theorems. Part II: Parabolic equations // Indiana Univ. Math. J. – 2007. – **56**, No 2. – P. 879–908.
7. Oleinik O. A., Radkevich E. V. Second order equations with nonnegative characteristic form. – New York: Plenum Press, 1973. – 259 p.
8. Landis E. M. Second order equations of elliptic and parabolic type. – Providence, RI: Amer. Math. Soc., 1998. – 203 p.
9. Samarskii A. A., Galaktionov V. A., Kurdyumov S. P., Mikhailov A. P. Blow-up in quasi-linear parabolic equations. – Berlin: Walter de Gruyter, 1995. – 535 p.

Mathematical Reviews, Ann Arbor, Michigan, USA

Received 08.11.2013

В. В. Курта

Принцип порівняння Ліувілля для розв'язків напівлінійних параболічних нерівностей другого порядку в частинних похідних у всьому просторі

Встановлено принцип порівняння Ліувілля для слабких розв'язків (u, v) напівлінійних параболічних нерівностей другого порядку в частинних похідних виду

$$u_t - \mathcal{L}u - |u|^{q-1}u \geq v_t - \mathcal{L}v - |v|^{q-1}v \quad (*)$$

у всьому просторі $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$. Тут $n \geq 1$, $q > 1$ і

$$\mathcal{L} = \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left[a_{ij}(t, x) \frac{\partial}{\partial x_j} \right],$$

де $a_{ij}(t, x)$ – вимірні, локально обмежені в просторі $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ функції такі, що $a_{ij}(t, x) = a_{ji}(t, x)$ і

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(t,x)\xi_i\xi_j \geq 0$$

для майже всіх $(t,x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ та всіх $\xi \in \mathbb{R}^n$. Показано, що критичні показники в одержаному принципі порівняння Ліувілля, які відповідають за неіснування нетривіальних (тобто таких, що $u \not\equiv v$) слабких розв'язків нерівності (*) у всьому просторі $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ залежать від поведінки коефіцієнтів оператора \mathcal{L} на нескінченності і збігаються з критичними показниками, отриманими для розв'язків нерівності (*) у напівпросторі $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^n$. Як прямі наслідки одержано нові теореми Ліувілля для невід'ємних, слабких розв'язків у нерівності (*) у всьому просторі $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ у випадку, коли $v \equiv 0$. Всі здобуті результати є новими й точними.

В. В. Курта

Принцип сравнения Лиувилля для решений полулинейных параболических неравенств второго порядка в частных производных во всем пространстве

Установлен принцип сравнения Лиувилля для слабых решений (u, v) полулинейных параболических неравенств второго порядка в частных производных вида

$$u_t - \mathcal{L}u - |u|^{q-1}u \geq v_t - \mathcal{L}v - |v|^{q-1}v \quad (*)$$

во всем пространстве $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$. Здесь $n \geq 1$, $q > 1$ и

$$\mathcal{L} = \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left[a_{ij}(t,x) \frac{\partial}{\partial x_j} \right],$$

где $a_{ij}(t,x)$ — измеримые, локально ограниченные в пространстве $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ функции такие, что $a_{ij}(t,x) = a_{ji}(t,x)$ и

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(t,x)\xi_i\xi_j \geq 0$$

для почти всех $(t,x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ и всех $\xi \in \mathbb{R}^n$. Показано, что критические показатели в полученном принципе сравнения Лиувилля, которые отвечают за несуществование нетривіальних (т. е. таких, что $u \not\equiv v$) слабких решений неравенства (*) во всем пространстве $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ зависят от поведения коэффициентов оператора \mathcal{L} на бесконечности и совпадают с критическими показателями, полученными для решений неравенства (*) в полупространстве $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^n$. В качестве прямых следствий получены новые теоремы Лиувилля для неотрицательных, слабых решений и неравенства (*) во всем пространстве $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ в случае, когда $v \equiv 0$. Все полученные результаты являются новыми и точными.



УДК 519.6

Академік НАН України І. В. Сергієнко, О. М. Литвин,
Л. С. Лобанова, Г. В. Залужна

Аналіз обчислювальних можливостей інтерлінаційного методу скінченних елементів розв'язання нестационарної задачі теплопровідності

Досліджуються деякі аспекти чисельної реалізації інтерлінаційного методу скінченних елементів розв'язання нестационарної задачі теплопровідності для плоских областей складної форми. Дослідження пропонується проводити тестуванням цього методу з використанням точних розв'язків, спосіб побудови яких наведено в роботі. Інтерлінаційний метод скінченних елементів дозволяє зводити нестационарну задачу теплопровідності до задачі Коші для системи звичайних диференціальних рівнянь меншого порядку, ніж у класичному методі скінченних елементів (МСЕ).

Актуальність теми. МСЕ є одним із методів, що найчастіше застосовуються для розв'язання реальних нестационарних задач з розподілу температури в областях складної форми. Практика вимагає розв'язання задач з великою кількістю елементів, а отже, і невідомих функцій $C_k(t)$, $k = \overline{1, M}$, що визначають сліди $C_k(t) = u(x_k, y_k, t)$, $k = \overline{1, M}$, наближеного розв'язку $u(x, y, t)$ у вузлах $A_k(x_k, y_k)$ елементів розбиття. Тому актуальною є розробка та дослідження нових методів розв'язання нестационарних задач теплопровідності, які використовують меншу кількість елементів для досягнення тієї ж точності $\varepsilon > 0$.

Аналіз літературних джерел. У 1990 р. вперше було запропоновано обчислювальні схеми розв'язання нестационарної задачі теплопровідності для двовимірних областей на основі використання інтерлінації функцій [1]. У 2000 р. запропонований метод був досліджений у випадку задачі з трьома просторовими змінними [2]. При застосуванні МСЕ кількість елементів може досягати кількох сотень і навіть тисяч [3, 4]. У роботах [5–9] розглянуто приклади розв'язання задачі стаціонарної та нестационарної теплопровідності для областей, що мають форму прямокутника, кутка, швеллера та Т-подібної області. Але на даний час відсутні публікації з аналізом можливостей вказаного методу.

© І. В. Сергієнко, О. М. Литвин, Л. С. Лобанова, Г. В. Залужна, 2014

Основні твердження роботи. Дано аналіз можливостей інтерлінаційного методу скінченних елементів на основі результатів обчислювального експерименту. Для обмеженої області $G \subset R^2$ будемо розв'язувати нестационарну крайову задачу

$$Lu \equiv \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(p_1(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(p_2(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} \right) + q(x, y)u = f(x, y, t), \quad (1)$$

$$(x, y) \in G, \quad t > 0,$$

при таких початковій і граничній умовах:

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y), \quad (x, y) \in G, \quad G \subseteq \Pi, \quad \Pi = [a, b] \times [c, d], \quad (2)$$

$$u(x, y, t)|_{\partial G} = \phi(x, y, t)|_{\partial G}. \quad (3)$$

Вважаємо, що $p_1(x, y), p_2(x, y) \in C^1(G)$, $q(x, y) \in C(G)$, $f(x, y, t) \in C(G \times R^+)$, $R^+ = [0, \infty)$ і розв'язок поставленої задачі задовольняє умови:

1) $u(x, y, t)$ має неперервні похідні до 2-го порядку за змінними x та y $u^{(p, q, 0)}(x, y, t) \in C(G \times R^+)$, $\forall t \geq 0$, $0 \leq p, q \leq 2$;

2) $\frac{\partial u}{\partial t} \in C(G \times R^+)$.

Крім того, вважаємо, що гранична функція $\varphi(x, y, t)$ і початкова функція $u_0(x, y)$ задовольняють співвідношення $\varphi(x, y, 0)|_{\partial G} = u_0(x, y)|_{\partial G}$.

Замінімо задачу (1)–(3) відповідною задачею з однорідними початковою і граничною умовами. Для цього введемо замість функції $u(x, y, t)$ функцію $v(x, y, t)$ таким чином: $u(x, y, t) = v(x, y, t) + \varphi(x, y, t) + u_0(x, y) - \varphi(x, y, 0)$.

Функція $v(x, y, t)$ повинна задовольняти диференціальне рівняння і однорідні початкову і граничну умови:

$$Lv(x, y, t) = f(x, y, t) - L\varphi(x, y, t) - L(u_0(x, y) - \varphi(x, y, 0)),$$

$$v(x, y, 0) = 0, \quad v(x, y, t)|_{\partial G} = 0,$$

$$u(x, y, t) \in C^{2,2,1}(G \times R^+) = \{v: v^{(p, q, 1)}(x, y, t) \in C(G \times R^+), 0 \leq p, q \leq 2\}.$$

Якщо u — побудована вказаним методом функція, то вона є точним розв'язком відповідної початково-крайової задачі. Далі вважаємо початкову та граничну умови однорідними.

Викладемо по кроках алгоритм знаходження наближеного розв'язку [1, 10].

Крок 1. Розіб'ємо область G на елементи прямими $x = x_k$, $k = \overline{0, M}$, та $y = y_l$, $l = \overline{0, N}$. В результаті область G розіб'ється на елементи таких типів:

прямокутні елементи $\Pi_{ij}^0 = \{(x, y): x_i \leq x \leq x_{i+1}, y_j \leq y \leq y_{j+1}\}$, $i = \overline{0, M-1}$, $j = \overline{0, N-1}$; прямокутні елементи Π_{ij}^r , $r = 1, \dots, 4$, з однією криволінійною стороною, яка належить границі ∂G . Так, $\Pi_{ij}^1 = \{(x, y): x_i \leq x \leq x_{i+1}, y_j \leq y \leq y_{j+1}(x), y_{j+1}(x) > y_j\}$. Аналогічний вигляд мають $\Pi_{ij}^2, \Pi_{ij}^3, \Pi_{ij}^4$;

трикутні елементи T_{ij}^r , $r = 1, \dots, 4$, з однією, взагалі кажучи, криволінійною стороною, яка належить границі ∂G . Елементи $T_{ij}^2, T_{ij}^3, T_{ij}^4$ мають вигляд, аналогічний $T_{ij}^1 = \{(x, y): x_i \leq x \leq x_{i+1}, y_j \leq y \leq \eta_{j+1}(x), \eta'_{j+1}(x) < 0, \eta_{j+1}(x_{i+1}) = y_j, \eta_{j+1}(x_i) = y_{j+1}\}$.

Крок 2. Будуємо в кожному із вказаних елементів оператор інтерлінації $OF(x, y, t)$ функції $F(x, y, t)$ на Π_{ij}^0 або Π_{ij}^r , або T_{ij}^r у вигляді:

$$OF(x, y, t) = \begin{cases} U_{ij}F(x, y, t), & (x, y) \in \Pi_{ij}^0, \\ V_{ij}^rF(x, y, t), & (x, y) \in \Pi_{ij}^r, \quad r \in \{1, 2, 3, 4\}, \\ W_{ij}^rF(x, y, t), & (x, y) \in T_{ij}^r, \quad r \in \{1, 2, 3, 4\}, \end{cases} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} U_{ij}F(x, y, t) = & \sum_{\mu=i}^{i+1} \sum_{s=0}^{\lambda} h_{\mu-i,s} \left(\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i} \right) (x_{i+1}-x_i)^s \phi_{\mu,s}(y, t) + \\ & + \sum_{\nu=j}^{j+1} \sum_{p=0}^{\lambda} h_{\nu-j,p} \left(\frac{y-y_j}{y_{j+1}-y_j} \right) (y_{j+1}-y_j)^p \psi_{\nu,p}(x, t) - \\ & - \sum_{\mu=i}^{i+1} \sum_{s=0}^{\lambda} \sum_{\nu=j}^{j+1} \sum_{p=0}^{\lambda} h_{\mu-i,s} \left(\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i} \right) (x_{i+1}-x_i)^s h_{\nu-j,p} \left(\frac{y-y_j}{y_{j+1}-y_j} \right) \times \\ & \times (y_{j+1}-y_j)^p D_{\mu,s,\nu,p}(t), \end{aligned} \quad (5)$$

де $\lambda \in \{1, \dots, 5\}$; допоміжні функції $h_{r,s}(u)$, $r, s \in \{0, 1\}$ мають такі властивості: $h_{r,s}^{(p)}(q) = \delta_{r,q} \delta_{s,p}$, $r, s, p, q \in \{0, \dots, \lambda\}$; $\delta_{s,p}$ — символ Кронекера. Тоді

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^\alpha U_{ij}F}{\partial x^\alpha} \right|_{x=x_k} &= \varphi_{k,\alpha}(y, t), \quad \alpha = \overline{0, \lambda}, \quad k = \overline{i, i+1}, \\ \left. \frac{\partial^\beta U_{ij}F}{\partial y^\beta} \right|_{y=y_\ell} &= \psi_{\ell,\beta}(x, t), \quad \beta = \overline{0, \lambda}, \quad \ell = \overline{j, j+1}. \end{aligned}$$

Вважатимемо, що

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^p \varphi_{i,s}}{\partial y^p} \right|_{y=y_j} &= \left. \frac{\partial^s \psi_{j,p}}{\partial x^s} \right|_{x=x_i} = D_{i,s,j,p}(t), \quad (x_i, y_j) \in G, \quad 0 \leq s, \quad p \leq \lambda, \quad \lambda \in \{1, 2\}, \\ V_{ij}^1 F(x, y, t) = & \sum_{\mu=i}^{i+1} \sum_{s=0}^1 h_{\mu-i,s} \left(\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i} \right) (x_{i+1}-x_i)^s \phi_{\mu,s}(y, t) + \\ & + \sum_{\nu=j}^{j+1} \sum_{p=0}^1 h_{\nu-j,p} \left(\frac{y-y_j}{y_{j+1}(x)-y_j} \right) (y_{j+1}(x)-y_j)^p \psi_{\nu,p}(x, t) - \\ & - \sum_{\mu=i}^{i+1} \sum_{s=0}^1 \sum_{\nu=j}^{j+1} \sum_{p=0}^1 h_{\mu-i,s} \left(\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i} \right) (x_{i+1}-x_i)^s h_{\nu-j,p} \left(\frac{y-y_j}{y_{j+1}(x)-y_j} \right) \times \\ & \times (y_{j+1}(x)-y_j)^p D_{i,s,j,p}(t). \end{aligned} \quad (6)$$

Для виконання умови $V_{ij}^1 F(x, y_{j+1}(x), t) = 0$ потрібно, щоб $\psi_{j+1,0}(x, t) \equiv 0$.

Теорема 1. Оператор $V_{ij}^1 F(x, y, t)$ інтерлінує функцію $F(x, y, t) \in C^1\left(\prod_{i,j}^1\right)$ та її похідні до порядку λ включно за змінними x та y на границі чотирикутника Π_{ij}^1 з однією криволінійною стороною, тобто,

$$V_{ij}^1 F(x, y, t) = F(x, y, t), \quad (x, y) \in \partial \prod_{ij}^1,$$

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} V_{ij}^1 F(x, y, t) \Big|_{x=x_p} = \frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} F(x, y, t) \Big|_{x=x_p},$$

$$\frac{\partial^\beta}{\partial y^\beta} V_{ij}^1 F(x, y, t) \Big|_{y=y_j} = \frac{\partial^\beta}{\partial y^\beta} F(x, y, t) \Big|_{y=y_j},$$

$$\frac{\partial^\beta}{\partial y^\beta} V_{ij}^1 F(x, y, t) \Big|_{y=y_{j+1}(x)} = \frac{\partial^\beta}{\partial y^\beta} F(x, y, t) \Big|_{y=y_{j+1}(x)},$$

$$\alpha = \overline{0, 1}, \quad p = i, i + 1, \quad \beta = \overline{0, 1} \quad \forall t \in [0, \infty).$$

Нехай $h_{1s}, h_{2s}, h_{is}^{(p)}(x_j) = \delta_{ij}\delta_{sp}, 0 \leq s, p \leq 2$ — базисні поліноми 3-го степеня поліноміальної двоточної ермітової інтерполяції функції $F(x, y, t)$. За допомогою операторів, аналогічних $EF(x, y, t) = \sum_{k=1}^2 \sum_{s=0}^1 F^{(s)}(x_k, y, t) h_{ks}(x)$, будемо оператори ермітової інтерполяції функції $F(x, y, t)$ трьох змінних:

$$E_{ij}^1 F(x, y, t) = \sum_{p=0}^1 F^{(p,0)}(x_i, y, t) h_{1,p} \left(\frac{x - x_i}{x_{i+1}(y) - x_i} \right) \frac{(x_{i+1}(y) - x_i)^p}{p!} +$$

$$+ \sum_{p=0}^1 F^{(p,0)}(x_{i+1}(y), y, t) h_{2,p} \left(\frac{x - x_i}{x_{i+1}(y) - x_i} \right) \frac{(x_{i+1}(y) - x_i)^p}{p!},$$

$$E_{ij}^2 F(x, y, t) = \sum_{s=0}^1 F^{(0,s)}(x, y_j, t) h_{1,s} \left(\frac{y - y_j}{y_{j+1}(x) - y_j} \right) \frac{(y_{j+1}(x) - y_j)^s}{s!} +$$

$$+ \sum_{s=0}^1 F^{(0,s)}(x, y_{j+1}(x), t) h_{2,s} \left(\frac{y - y_j}{y_{j+1}(x) - y_j} \right) \frac{(y_{j+1}(x) - y_j)^s}{s!}.$$

Тоді оператор інтерлінації функції $F(x, y, t)$ разом з її частинними похідними до порядку λ за змінними X та Y на всіх сторонах трикутника T_{ij}^1 можна записати у вигляді

$$T_{ij}^1 F(x, y, t) = (E_{ij}^1 + E_{ij}^2 - E_{ij}^1 E_{ij}^2) F(x, y, t), \quad (x, y) \in T_{ij}^1.$$

Теорема 2. Оператор $T_{ij}^1 F(x, y, t)$ має такі властивості:

$$\frac{\partial^\alpha T_{ij}^1 F(x, y, t)}{\partial x^\alpha} \Big|_{x=x_i} = \frac{\partial^\alpha F(x, y, t)}{\partial x^\alpha} \Big|_{x=x_i},$$

$$\left. \frac{\partial^\alpha T_{ij}^1 F(x, y, t)}{\partial x^\alpha} \right|_{x=x_{i+1}(y)} = \left. \frac{\partial^\alpha F(x, y, t)}{\partial x^\alpha} \right|_{x=x_{i+1}(y)},$$

$$\left. \frac{\partial^\beta T_{ij}^1 F(x, y, t)}{\partial y^\beta} \right|_{y=y_j} = \left. \frac{\partial^\beta F(x, y, t)}{\partial y^\beta} \right|_{y=y_j},$$

$$\left. \frac{\partial^\beta T_{ij}^1 F(x, y, t)}{\partial y^\beta} \right|_{y=y_{j+1}(x)} = \left. \frac{\partial^\beta F(x, y, t)}{\partial y^\beta} \right|_{y=y_{j+1}(x)},$$

$\alpha = \overline{0, 1}$, $\beta = \overline{0, 1}$ всюди, за виключенням кутових точок.

Аналогічні твердження можна написати також для T_{ij}^r , $r = \overline{2, 4}$.

Теорема 3. Нехай оператори $\Pi_{ij}^r F(x, y, t)$, $r = \overline{0, 4}$, інтерлінують $F(x, y, t)$ на сторонах чотирикутників $\Pi_{ij}^r \subset G$, а оператори $T_{ij}^r F(x, y, t)$, $r = \overline{1, 4}$, — на сторонах трикутників $T_{ij}^r \subset G$ з криволінійною гіпотенузою. Тоді оператор

$$O_G F(x, y, t) = \begin{cases} \prod_{ij}^r F(x, y, t), & (x, y) \in \Pi_{ij}^r, \quad r = 0 \vee 1 \vee \dots \vee 4, \\ T_{ij}^r F(x, y, t), & (x, y) \in T_{ij}^r, \quad r = 1 \vee \dots \vee 4, \end{cases} \quad \forall t \geq 0$$

при умових, що $M_{i,j+1} = M(x_i, y_{j+1}(x_i))$, $M_{i+1,j} = M(x_{i+1}(y_j), y_j)$,

$$\lim_{(x,y) \rightarrow M_{i+1,j}} O_G F(x, y, t) = F(x_{i+1}(y_j), y_j, t),$$

$$\lim_{(x,y) \rightarrow M_{i,j+1}} O_G F(x, y, t) = F(x_i, y_{j+1}(x_i), t),$$

$$\lim_{(x,y) \rightarrow M_{i+1,j}} \frac{\partial}{\partial x} O_G F(x, y, t) = \left. \frac{\partial}{\partial x} F(x, y, t) \right|_{M_{i+1,j}},$$

$$\lim_{(x,y) \rightarrow M_{i+1,j}} \frac{\partial}{\partial y} O_G F(x, y, t) = \left. \frac{\partial}{\partial y} F(x, y, t) \right|_{M_{i+1,j}},$$

$$\lim_{(x,y) \rightarrow M_{i,j+1}} \frac{\partial}{\partial x} O_G F(x, y, t) = \left. \frac{\partial}{\partial x} F(x, y, t) \right|_{M_{i,j+1}},$$

$$\lim_{(x,y) \rightarrow M_{i,j+1}} \frac{\partial}{\partial y} O_G F(x, y, t) = \left. \frac{\partial}{\partial y} F(x, y, t) \right|_{M_{i,j+1}},$$

інтерлінує функцію $F(x, y, t)$ на прямих $x = x_k \in [a, b]$ та $y = y_\ell \in [c, d]$, а також на границі ∂G : $O_G F(x, y, t) = F(x, y, t)$, $\frac{\partial}{\partial x} O_G F(x_k, y, t) = \frac{\partial}{\partial x} F(x_k, y, t)$, $\frac{\partial}{\partial y} O_G F(x, y_j, t) = \frac{\partial}{\partial y} F(x, y_j, t)$. При цьому $O_G F(x, y, t) \in C^1(G) \forall F(x, y, t) \in C^{2,2,1}(G) \forall t \geq 0$, $O_G F(x, y, t) \in W_2^1(G) \forall t \geq 0$.

Крок 3. Для побудови наближеного розв'язку інтерлінаційним МСЕ замінюємо невідомі функції $\varphi_{\mu,s}(x, t)$ та $\psi_{\nu,p}(y, t)$ сплайнами 1-го степеня:

$$\varphi_{\mu,s}(x, t) = \sum_{i=0}^{M^2} A_{i,\mu s}(t) h_i(x), \quad h_i(x) = h(x, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}).$$

Для випадку рівномірного розбиття $x_k = a + k(b - a)/n$, $y_\ell = c + \ell(d - c)/n$, $k, \ell = \overline{0, n}$, $h_k(x) = h(nx - k)$, $h_\ell(y) = h(ny - \ell)$, де $h(\xi) = 2^{-1}(|\xi + 1| - 2|\xi| + |\xi - 1|)$, наближений розв'язок подається у вигляді:

$$u(x, y, t) = \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{j'=1}^{n^2-1} u_{kn, j'}(t) h(nx - k) h(n^2 y - j') + \sum_{\ell=1}^{n-1} \sum_{i'=1}^{n^2-1} u_{i', \ell n}(t) h(n^2 x - i') h(ny - \ell) - \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{\ell=1}^{n-1} u_{kn, \ell n} h(nx - k) h(ny - \ell), \quad (7)$$

де $u_{ij}(t)$, $(i, j) \in J$ — шукані, $J = \{(i, j), (i', \ell), (k, j') : (i/n, j/n) \in G, (i'/n^2, \ell/n^2) \in G, (k/n^2, j'/n^2) \in G\}$. Для їх знаходження розв'язується така система диференціальних рівнянь:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}, \varphi_{kn, j'} \right) (t) + [u, \varphi_{kn, j'}](t) = (f, \varphi_{kn, j'}) (t) \quad (8)$$

$$(j' = \overline{1, n^2 - 1}; j' \neq \ell n; k, \ell = \overline{1, n - 1}, (k, j') \in J),$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t_j}, \varphi_{i', \ell n} \right) (t) + [u, \varphi_{i', \ell n}](t) = (f, \varphi_{i', \ell n})(t) \quad (9)$$

$$(i' = \overline{1, n^2 - 1}; i' \neq kn; k, \ell = \overline{1, n - 1}, (i', \ell) \in J),$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}, \varphi_{kn, \ell n} \right) (t) + [u, \varphi_{kn, \ell n}](t) = (f, \varphi_{kn, \ell n})(t) \quad (k, \ell = \overline{1, n - 1}; (k, \ell) \in J) \quad (10)$$

при таких початкових умовах (при $(k, \ell = \overline{1, n - 1}; i', j' = \overline{1, n^2 - 1})$):

$$u_{kn, j'}(0) = u_0 \left(\frac{k}{n}, \frac{j'}{n^2} \right) = 0, \quad u_{i', \ell n}(0) = u_0 \left(\frac{i'}{n^2}, \frac{\ell}{n} \right) = 0, \quad u_{kn, \ell n}(0) = u_0 \left(\frac{k}{n}, \frac{\ell}{n} \right) = 0.$$

Тут використано позначення:

$$(\psi_1, \psi_2) = \iint_G \psi_1 \psi_2 dx dy, \quad [u, \psi] = \iint_G \left[p_1 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} + p_2 \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial y} \right] dx dy.$$

Крок 4. Для тестування запропонованого методу застосуємо загальний метод побудови точних розв'язків тестових задач. Він полягає [8] у представленні допоміжних функцій $h_{1k}(x)$, $h_{2\ell}(y) \in C^r(R)$, $r = 2, 3, 4, 5$, сплайнами r -го степеня ($r \in \{3, 4, 5\}$) і знаходженні невідомих функцій $u_{ij}(t)$ шляхом розв'язання сформульованої вище задачі Коші з однорідними початковими умовами для системи зичайних диференціальних рівнянь (8)–(10).

Відзначимо, що тестові точні розв'язки $O(x, y, t)$ можна будувати у вигляді оператора інтерлінації (4)–(6), довільним чином вибираючи сліди $\varphi_{\mu s}(y)$, $\psi_{\nu p}(x)$ та $D_{\mu, s, \nu, p}(t)$ так, щоб точно були задовільнені початкова і гранична умови, або за допомогою R -функцій [6], які дозволяють точно задовольнити граничну умову, зберігаючи при цьому потрібний клас диференційовності. Застосовуємо до цієї функції $u = O(x, y, t)$ диференціальний оператор

$$Lu(x, y, t) = \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(p_1(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(p_2(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} \right) + q(x, y) u(x, y, t) \equiv g(x, y, t).$$

В результаті отримаємо, що функція $u = O(x, y, t)$ задовольняє рівняння

$$Lu(x, y, t) = g(x, y, t) \quad (11)$$

з відомою правою частиною $g(x, y, t)$. Якщо u — побудована вказаним вище методом функція, то вона є точним розв'язком відповідної початково-крайової задачі.

Теорема 4. *Якщо тестовий приклад побудований з використанням сплайн-інтерполяції на основі сплайн-інтерлінації [5, с. 295–302] і наближений розв'язок знаходимо теж у вигляді сплайн-інтерполяції на основі сплайн-інтерлінації з невідомими параметрами, то наближений розв'язок буде збігатися з точним розв'язком.*

Таким чином, у даній роботі пропонується для тестування інтерлінаційного методу скінченних елементів використовувати тестові точні розв'язки, які належать різним класам диференційовності. Якщо ми будемо розв'язувати задачу (11) при відповідних початкових і граничних умовах іншим методом (наприклад, класичним МСЕ або методом сіток), то зможемо апостеріорно оцінити похибку наближення, порівнюючи наближений розв'язок з точним.

1. Сергієнко І. В., Литвин О. М. Чисельна реалізація методу ЛІДР для рівняння нестационарної теплопровідності // Доп. АН УРСР. Сер. А. – 1990. – № 10. – С. 69–73.
2. Сергієнко І. В., Литвин О. М., Дробот Є. І. Чисельна реалізація методу ЛІДР для рівняння нестационарної теплопровідності з трьома просторовими змінними // Доп. НАН України. – 2000. – № 2. – С. 67–73.
3. *Современные проблемы концентрации напряжений* // Тр. междунар. научной конф., посвященной 75-летию акад. НАН Украины А. С. Космодамианского. – Донецк, 21.06.98–25.06.98. – ДонГУ, 1998. – С. 417.
4. Babuska I. Finite element method for domain with corners // Computing. – 1970. – 6, No 3. – P. 264–273.
5. Литвин О. М. Інтерлінація функцій та деякі її застосування. – Харків: Основа, 2002. – 544 с.
6. Рвачев В. Л. Теория R-функций и некоторые ее приложения. – Киев: Наук. думка, 1982. – 552 с.
7. Литвин О. М., Лобанова Л. С., Залужна Г. В. Розв'язання нестационарної задачі теплопровідності для пластини інтерлінаційним методом скінченних елементів // Пр. Міжнар. симп. “Питання оптимізації обчислень (ПОО–XXXV)”. – Київ: Ін-т кібернетики ім. В. М. Глушкова НАН України, 2009. – С. 14–19.
8. Литвин О. М., Лобанова Л. С., Залужна Г. В. Про один метод побудови точного розв'язку початково-крайової задачі для рівняння нестационарної теплопровідності в області складної форми // Математ. та комп'ютерне моделювання. Сер.: Фіз.-мат. науки. Зб. наук. праць Ін-ту кібернетики ім. В. М. Глушкова НАН України, Кам'янець-Подільського національного ун-ту ім. Івана Огієнка. – Кам'янець-Подільський національний університет ім. Івана Огієнка, 2010. – Вип. 4. – С. 132–138.
9. Литвин О. М., Лобанова Л. С., Залужна Г. В. Про один підхід до тестування нових методів розв'язання нестационарної задачі теплопровідності // Искусственный интеллект. – 2012. – № 1. – С. 219–228.
10. Литвин О. Н., Лобанова Л. С., Залужна Г. В. Численная реализация метода линейных интегро-дифференциальных уравнений для уравнения нестационарной теплопроводности с двумя пространственными переменными // Управляющие системы и машины. – 2012. – № 4. – С. 11–19.

Інститут кібернетики ім. В. М. Глушкова
НАН України, Київ
Українська інженерно-педагогічна академія, Харків

Надійшло до редакції 25.07.2013

Академик НАН Украины **И. В. Сергиенко, О. Н. Литвин, Л. С. Лобанова, Г. В. Залужная**

Анализ вычислительных возможностей метода интерлинейации конечных элементов решения нестационарной задачи теплопроводности

Исследуются некоторые аспекты численной реализации метода интерлинейации конечных элементов решения нестационарной задачи теплопроводности для плоских областей сложной формы. Исследования предлагается проводить тестированием этого метода с использованием точных решений, способ построения которых приводится в работе. Метод интерлинейации конечных элементов позволяет свести нестационарную задачу теплопроводности к задаче Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений меньшего порядка, чем в классическом методе конечных элементов.

Academician of the NAS of Ukraine **I. V. Sergienko, O. M. Lytvyn, L. S. Lobanova, G. V. Zaluzhna**

Analysis of the computing power of the interlineational finite element method of solution of the non-stationary heat conduction problem

Some aspects of a numerical implementation of the interlineational finite element method solution of the non-stationary heat conduction problem for planar domains with complex shapes are considered. It is proposed to test this method, by using exact solutions, for which the method of construction is proposed by the authors. The interlineational finite element method allows us to reduce the non-stationary heat conduction problem to the Cauchy problem for a system of ordinary differential equations of lower order than in the classical finite element method.

Член-корреспондент НАН Украины **А. И. Шевченко, А. С. Миненко, А. С. Гололобова**

Моделирование сложных теплофизических систем с применением нечеткой логики

Исследуется один класс задач типа Стефана, имеющий место в теплофизике. Построено приближенное решение этой задачи. Управление процессом кристаллизации осуществляется с использованием нечеткой логики.

Двумерная модель кристаллизации с конвекцией. Процессы кристаллизации, которые встречаются в природе, сопровождаются конвективным перемешиванием в жидкой фазе. Ниже рассматривается постановка задачи, в которой конвекция вызвана наличием заданного вихря интенсивности μ . Исследование состоит в приближенном анализе свободной границы от интенсивности μ . Рассмотрим стационарный случай в полуполосе $D = \{-1 < x < 1, H < y < 0\}$. Обозначим через γ кривую, отделяющую жидкую фазу D_γ^+ от твердой D_γ^- , при этом концы γ лежат на вертикалях $x = \pm 1$. Обе области D_γ^+ и D_γ^- предполагаются односвязными и симметричными относительно оси y . Пусть $\psi(x, y)$ — функция тока, которая удовлетворяет условиям:

$$\Delta\psi = \mu, \quad (x, y) \in D_\gamma^+, \quad \mu = \text{const} > 0, \quad \psi = 0, \quad (x, y) \in \partial D_\gamma^+.$$

Тут μ считается достаточно малым численным параметром. Требуется определить, кроме функции тока $\psi(x, y)$, тройку $(u^\pm(x, y), \gamma)$ по следующим условиям:

$$\begin{aligned} \lambda\Delta u^+ - \psi_y u_x^+ + \psi_x u_y^+ &= 0, & (x, y) \in D_\gamma^+, & \quad \lambda = \text{const}, \\ u^+(x, 0) &= \vartheta, & -1 \leq x \leq 1, & \quad \vartheta = \text{const} > 1, \\ u_x^\pm \pm \omega_0^\pm u^\pm &= 0, & x = \pm 1, & \quad (x, y) \in \Gamma_\gamma^+ \cup \Gamma_\gamma^-, \\ \Delta \bar{u} &= 0, & (x, y) \in D_\gamma^-, & \quad \bar{u}(x, H) = 0, \quad -1 \leq x \leq 1, \\ \bar{u}(x, y) &= u^+(x, y) = 1, & |\nabla u^-|^2 - k^2 |\nabla u^+|^2 &= 0, \quad (x, y) \in \gamma, \end{aligned} \tag{1}$$

где $\Gamma_\gamma^+ = \partial D_\gamma^+ \cap \{x = \pm 1\}$; $\Gamma_\gamma^- = \partial D_\gamma^- \cap \{x = \pm 1\}$; ω_0^\pm — числа Нусельта.

Предложен метод изучения нелинейной задачи (1), состоящий в разложении решения в ряд по степеням малого параметра μ :

$$\begin{aligned} \psi(x, y; \mu) &= \sum_{k=0}^{\infty} \mu^k \psi_k(x, y), & u^\pm(x, y; \mu) &= \sum_{k=0}^{\infty} \mu^k u_k^\pm(x, y), \\ y(x; \mu) &= \sum_{k=0}^{\infty} \mu^k y_k(x), & \gamma : y &= y(x; \mu), \quad -1 \leq x \leq 1. \end{aligned}$$

Изучим теперь нулевые и первые приближения задачи (1).

Приближенное решение задачи (1). Нулевое приближение $(u_o^\pm(x, y), \gamma_o)$ задачи (1) ищем из условия минимума функционала

$$Y(u^+, u^-, \gamma_0) = \iint_{D_{\gamma_0}^-} [u_x^{-2} + u_y^{-2}] dx dy + k^2 \iint_{D_{\gamma_0}^+} [u_x^{+2} + u_y^{+2}] dx dy + \\ + k^2 \omega_0^+ \int_{\Gamma_\gamma^+} [u^{+2} - 1] dy + \omega_0^- \int_{\Gamma_\gamma^-} [u^{-2} - 1] dy$$

на соответствующем множестве допустимых функций в классе $u_y^+ > 0$ в D_γ^\pm . Этот функционал может быть представлен следующим образом:

$$I(y_1, y_2) = \iint_{\Delta_1} \frac{1 + y_{1x}^2}{y_{1u}} dx du + k^2 \iint_{\Delta_2} \frac{1 + y_{2x}^2}{y_{2u}} dx du + \\ + \omega_0^+ k^2 \int_1^\vartheta (u^2 - 1) [y_{2u}(1, u) + y_{2u}(-1, u)] du + \omega_0^- \int_0^1 (u^2 - 1) [y_{1u}(1, u) + y_{1u}(-1, u)] du,$$

где $\Delta_1 = (-1 < x < 1, 0 < u < 1)$, $\Delta_2 = (-1 < x < 1, 1 < u < \vartheta)$, $y_1(x, u)$ и $y_2(x, u)$ — решения уравнений $u_1(x, y) - u_1 = 0$, $u_2(x, y) - u_2 = 0$. Функционал $I(y_1, y_2)$ минимизируется методом Ритца [1].

Далее пусть $u(x, y) = u_1^+(x, y)$ при $(x, y) \in \overline{D}_{\gamma_0}^+$, и $u(x, y) = u_1^-(x, y)$, если $(x, y) \in \overline{D}_{\gamma_0}^-$, где $u(x, y)$ — решение следующей задачи: $\Delta u = f(x, y)$, $(x, y) \in D$, $u(x, 0) = 0$, $u(x, H) = 0$, $u_x(0, y) = 0$, $H \leq y \leq 0$, $u_x + \omega_0^\pm u = 0$, $x = 1$, $(x, y) \in \partial D_\gamma^\pm \setminus \gamma$. Справедливо такое утверждение.

Теорема 1. Пусть μ — достаточно малая величина. Тогда справедливо представление

$$y(x; \mu) = y_0(x) - \mu \frac{u_1^\pm(x, y)}{u_{0y}^\pm(x, y)} + o(\mu), \quad (x, y) \in \gamma_0,$$

где $y_0(x)$ — решение уравнения $u_0(x, y) - 1 = 0$ в классе функций $u_{0y} > 0$ в D .

Пространственная модель кристаллизации. Пусть Ω — заданная область в R^3 , представляющая собой цилиндр $\Omega = \{(x_1, x_2, x_3) : x_1^2 + x_2^2 < R^2, x_3 < 0\}$, и пусть Q — боковая поверхность Ω . Обозначим через Γ достаточно гладкую поверхность (поверхность кристаллизации, отделяющую жидкую часть металла D_γ^+ от твердой D_γ^-). Поверхность Γ разбивает боковую поверхность Q на два куса Γ^+ и Γ^- , т. е. $Q = \Gamma^+ \cup \Gamma^-$. Задача Стефана при наличии конвективных движений в жидкой фазе состоит в нахождении поля скоростей в жидкой фазе $\vec{V}(x) = (V_1(x), V_2(x), V_3(x))$, давления $p(x)$, распределения температур $u^\pm(x)$ и свободной поверхности по следующим условиям:

$$\lambda(\overline{\nabla \nabla}) u^+(x) = k \nabla^2 u^+(x), \quad x \in \Omega_\gamma^+, \\ \nabla^2 \bar{u}(x) = 0, \quad x \in \Omega_\gamma^-, \\ (\overline{\nabla \nabla}) \vec{V}(x) + \nabla p(x) = \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \vec{V}(x) + \vec{f}(u^+), \quad \text{div } \vec{V}(x) = 0, \quad (2)$$

$$x \in \Omega^+, \quad \vec{V}|_{\partial\Omega^+} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial n} u^+|_{x \in H} = h(x),$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial n} u^\pm + \omega_0^\pm u^\pm \right] = 0, \quad u^+ = u^- = 1, \quad \frac{\partial u^-}{\partial u} - k \frac{\partial u^+}{\partial u} = 0, \quad x \in \Gamma,$$

где $x = (x_1, x_2, x_3)$; Ω^\pm — области соответственно жидкой и твердой фаз; H — верхнее основание цилиндра Ω .

В задаче (2) параметры k, λ, Re допускаются постоянными величинами, $\nabla = (\partial/\partial x_1, \partial/\partial x_2, \partial/\partial x_3)$, функция $\vec{f}(u^+)$ принадлежит классу $C^2(R^1)$, $\vec{f}'(u)$ ограничена в R^1 . При малых числах Рейнольдса Re задача (2) имеет решение, при этом $u^\pm \in C^{3+\alpha}(\bar{\Omega}^\pm)$, $\vec{V}(x) \in C^{1+\alpha}(\bar{\Omega}^+)$, а Γ принадлежит классу $C^{3+\alpha}$ [2].

Приближенное решение задачи (2). Пусть $u_0^\pm(x)$ — решение стационарной задачи (2) без конвекции в области Ω_0^\pm с теми же условиями из (2) при $\text{Re} = 0$, а Γ_0 — свободная поверхность. Для точек поверхности Γ_0 введем криволинейные координаты $\omega = (\omega_1, \omega_2)$. Свободную поверхность Γ будем искать в виде $\Gamma = \{x = x(\omega) + \vec{n}(\omega)\rho(\omega), x(\omega) \in \Gamma_0\}$ с некоторой функцией $\rho(\omega)$ класса $C^{3+\alpha}(\Gamma_0)$. Допустим, что неизвестные величины нашей задачи можно искать в виде $u^\pm(x; \text{Re}) = \sum_{k=0}^{\infty} (\text{Re})^k u_k^\pm(x)$, $V_i(x; \text{Re}) = \sum_{k=0}^{\infty} (\text{Re})^k V_{ik}(x)$, $p(x; \text{Re}) = \sum_{k=0}^{\infty} (\text{Re})^k p_k(x)$, $p(\omega; \text{Re}) = \sum_{k=1}^{\infty} (\text{Re})^k p_k(\omega)$, $i = 1, 2, 3$. Справедливо утверждение.

Теорема 2. Пусть $u_1^\pm(x)$ и $u_2^\pm(x)$ — решения следующих задач:

$$(\vec{V}_2 \nabla) \vec{V}_1 + \nabla p_1 = \nabla^2 \vec{V}_2 + \vec{f}'(u_0^+) u_1^+, \quad \text{div } \vec{V}_2 = 0, \quad x \in \Omega_0^+, \quad \vec{V}_2|_{\partial\Omega_0^+} = 0,$$

$$\lambda(\vec{V}_1 \nabla) u_1^+ + \lambda(\vec{V}_2 \nabla) u_0^+ = \nabla^2 u_2^+, \quad x \in \Omega_0^+; \quad \nabla^2 u_2^- = 0,$$

$$x \in \Omega_0^-; \quad \left(\frac{\partial u_2^\pm}{\partial n} + \omega_0^\pm u_2^\pm \right) \Big|_{x \in \Gamma^+ \cup \Gamma^-} = 0, \quad \frac{\partial u_2^\pm}{\partial n} = 0, \quad x \in H;$$

$$\nabla^2 u_1(x) = F_1(x), \quad x \in \Omega; \quad \frac{\partial u_1}{\partial n} \Big|_H = 0, \quad \left(\frac{\partial u_1}{\partial n} + \omega_0^\pm u_1 \right) \Big|_{x \in \Gamma} = 0,$$

где $F_1(x) = \lambda(\vec{V}_1 \nabla) u_0^+$ при $x \in \bar{\Omega}_0^+$ и $F_1(x) = 0$ при $x \in \bar{\Omega}_0^-$. Тогда при малых числах Re справедлива формула

$$\Gamma : x = x(\omega) - \vec{n}(\omega) \text{Re} \frac{u_1^+(x(\omega))}{|\nabla u_0^\pm(x(\omega))|} - \vec{n}(\omega) (\text{Re})^2 \frac{u_2^\pm(x(\omega)) - f_1(x(\omega))}{|\nabla u_0^\pm(x(\omega))|}, \quad x(\omega) \in \Gamma_0.$$

Управление процессом кристаллизации с применением нечеткой логики. Рассмотрим процесс кристаллизации металла, который имеет место в спецметаллургии [3]. Пусть u^* — температура, при которой происходит отделение слитка от стенок кристаллизатора. Эта температура будет достигаться при воздействии потоков мощности w^1, w^2, w^3 , причем поток w^3 равномерно распределен в центре слитка. Далее рассматриваются все факторы X_1, X_2, \dots, X_n , которые влияют на процесс кристаллизации, а также условия Y_1, Y_2, \dots, Y_n , при которых происходит появление нового слитка. Затем строится нечеткое управление с помощью метода Мамдани, который позволяет осуществить процесс управления в задаче кристаллизации. Числовые параметры, участвующие в построении управления задачи, выбираются из [3].

1. *Миненко А. С.* Исследование одной конвективной задачи Стефана методом Ритца // Укр. мат. журн. – 2007. – **59**, № 11. – С. 1546–1556.
2. *Миненко А. С.* Вариационные задачи со свободной границей. – Киев: Наук. думка, 2005. – 354 с.
3. *Патон Б. Е.* Избранные труды. – Киев: Изд-во Ин-та электросварки им. Е. О. Патона НАН Украины, 2008. – 893 с.

*Институт информатики и искусственного
интеллекта ДонНТУ, Донецк*

Поступило в редакцию 26.02.2013

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

Моделювання складних теплофізичних систем із застосуванням нечіткої логіки

Досліджується один клас задач типу Стефана, який має місце в теплофізиці. Побудовано наближений розв'язок цієї задачі. Управління цим процесом кристалізації здійснюється з використанням нечіткої логіки.

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

Simulation of complex thermal physical systems with the use of a fuzzy logic

The Stephan problem is investigated. The approximate solution is constructed. The control over the process of crystallization with using a fuzzy logic is realized.

On walks of variable length in the Schubert incidence systems and multivariate flow ciphers

(Presented by Corresponding Member of the NAS of Ukraine O. M. Trofimchuk)

The flow cipher algorithm based on walks at the flag variety of a Schubert system over the finite commutative ring is proposed. The restriction of the incidence relation of the geometry of a finite simple Lie group of the normal type on the union of large Schubert cells of the maximal dimension is an example of the Schubert system. More general examples are connected with Kac-Moody groups. We introduce some applications of such ciphers based on periodic walks for the construction of multivariate private keys, security of which is connected with the discrete logarithm problem for cyclic subgroups of polynomial transformations of increasing order.

Schubert systems, definitions, and examples. All graphs we consider are *simple*, i. e. undirected without loops and multiple edges. Let $V(G)$ and $E(G)$ denote the set of vertices and the set of edges of G , respectively. Then $|V(G)|$ is called the *order* of G , and $|E(G)|$ is called the *size* of G . A path in G is called *simple* if all its vertices are distinct. When it is convenient, we shall identify G with the corresponding antireflexive binary relation on $V(G)$, i. e. $E(G)$ is a subset of $V(G) \times V(G)$, and write $v G u$ for the adjacent vertices u and v (or neighbors).

The *girth* of a graph G , denoted by $g = g(G)$, is the length of the shortest cycle in G .

We use a term *incidence structure* for a triple consisting of the set Γ , its partition $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \dots \cup \Gamma_n$, and a symmetric antireflexive binary relation I (incidence) on the set Γ such that xIy implies $x \in \Gamma_i, y \in \Gamma_j$, and $i \neq j$.

We refer to the number n as the rank of an *incidence structure*. In the case $n = 2$, the triple is called an incidence structure, and $P = \Gamma_1$ and $L = \Gamma_2$ are called the set of points and the set of lines, respectively.

Let K be a finite commutative ring. Linguistic is called the incidence structure with the point set $\Gamma_1 = K^{s+m}$ and the line set $\Gamma_2 = K^{r+m}$ such that point $(x) = (x_1, x_2, \dots, x_s, x_{s+1}, \dots, x_{s+m})$ is incident to the line $[y] = [y_1, y_2, \dots, y_r, y_{r+1}, y_{r+2}, \dots, y_{r+m}]$ if and only if the relations

$$\begin{aligned} a_1x_{s+1} + b_1y_{r+1} &= f_1(x_1, x_2, \dots, x_s, y_1, y_2, \dots, y_r), \\ a_2x_{s+2} + b_2y_{r+2} &= f_2(x_1, x_2, \dots, x_{s+1}, y_1, y_2, \dots, y_{r+1}), \\ &\dots\dots\dots \\ a_mx_{s+m} + b_my_{r+m} &= f_m(x_1, x_2, \dots, x_{s+m-1}, y_1, y_2, \dots, y_{r+m-1}) \end{aligned}$$

hold, where a_j and $b_j, j = 1, 2, \dots, m$, are not zero divisors, and f_j are multivariate polynomials with coefficients from K . Brackets and parentheses allow us to distinguish point from line (see [2]). The color $r(p)$ ($r([l])$) of point (p) (line $[l]$) is defined as the projection of an element p from the free module on its initial s (respectively, r) coordinates. As follows from the definition of linguistic incidence structure, there exists the unique neighbor with a chosen color for each vertex of the incidence graph.

Recall that a flag F of the incidence system $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \dots \cup \Gamma_m$ is the clique of a simple graph I . This means that $x, y \in F$ implies xIy .

Let $\Omega = \{1, 2, \dots, t\}$ be a finite set. For each subset M in Ω and each commutative ring K , we consider the totality $K^M = \{f: M \rightarrow K\}$ of partial functions from Ω into K with support $\text{supp}(f) = M$. It is convenient for us to write element $f \in K^M$ as a pair (M, f) . Let M_1 and M_2 be nonempty sets of Ω . We denote, by $L(M_1, M_2, K)$, the linguistic graph with a point set K^{M_1} and a line set K^{M_2} such that the incidence of the point (M_1, f_1) and the line (M_2, f_2) will be given by the following conditions:

$$m_i f_1(s_i) + l_i f_2(s_i) = F_i(f_1(r_1), f_1(r_2), \dots, f_1(r_{d_1}), f_2(p_1), f_2(p_2), \dots, f_2(p_{d_2}), f_1(s_1), \\ f_1(s_2), \dots, f_1(s_{i-1}), f_2(s_1), f_2(s_2), \dots, f_2(s_{i-1})), \quad i = 1, 2, \dots, t.$$

Here, elements of $M_1 - M_1 \cap M_2$ and $M_2 - M_1 \cap M_2$ are defined by lists $\{r_1, r_2, \dots, r_{d_1}\}$ and $\{p_1, p_2, \dots, p_{d_2}\}$, and elements of $M_1 \cap M_2$ are listed as s_1, s_2, \dots, s_t . The color $r(v)$ of the vertex $v = (M_i, f_i)$, $i = 1, 2$, in the graph $L(M_1, M_2, K)$ is defined as the restriction of f_i onto $M_i - M_1 \cap M_2$. A linguistic incidence system $L(M_t, \Omega, K)$, $t \in J$, is defined for the family of subsets M_t , $t \in \Omega$, of Ω and the commutative ring K as a disjoint union of K^{M_t} , $t \in J$, together with the incidence relation I such that its restriction I_{ij} on $K^{M_i} \cup K^{M_j}$, where $i, j \in J$ are defined by a linguistic graph $L(M_1, M_2, K)$. We call the Schubert system a linguistic incidence structure $L(M_t, \Omega, K)$, $t \in J$, with a nonempty set of maximal flags of rank $|J|$ such that, for each order i_1, i_2, \dots, i_s on J , each maximal flag is uniquely defined by its representative of $K^{M_{i_1}}$, its neighbor of kind (M_{i_2}, f_{i_2}) is uniquely defined by $f_{i_2}|_{M_{i_2} - M_{i_1}}$, a flag element of kind (M_{i_3}, f_{i_3}) is uniquely defined by the projection $f_{i_3}|_{M_{i_3} - M_{i_1} \cap M_{i_2}}$, and a representative of $K^{M_{i_s}}$ is uniquely defined by the projection of f_{i_s} onto $K_{i_s} - M_{i_1} \cap M_{i_2} \cap \dots \cap M_{i_{s-1}}$.

As follows from the definition of Schubert systems, the sets $D_i = M_i - M_1 \cap M_2 \dots M_{i-1} \cap M_{i+1} \cap M_{i+2} \dots M_s$ are nonempty. For each flag of kind $(M_1, f_1), (M_2, f_2), \dots, (M_{i-1}, f_{i-1}), (M_{i+1}, f_{i+1}), (M_{i+2}, f_{i+2}), \dots, (M_s, f_s)$, its completion to the maximal flag by adding (M_i, f_i) is uniquely defined by the projection of f_i onto D_i . A natural example of the Schubert system can be obtained via the restriction of the incidence relation of the geometry $\Gamma(G) = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \dots \cup \Gamma_n$ of a simple Lie group G of the normal type onto a disjoint union of large Schubert cells of maximal degree in each Γ_i , $i = 1, 2, \dots, n$.

More general examples correspond to Kac–Moody groups. Let L be a Kac–Moody algebra defined by the Cartan matrix A over the field of complex numbers C . The algebra L can be written in the form $L^- + L_0 + L^+$, where L_0 is a Cartan subalgebra, and L^+ is a direct sum of root subspaces corresponding to positive real and imaginary roots r in the chosen Chevalley basis. Let a_1, a_2, \dots, a_n be the list of fundamental roots, then dual elements $a_1^*, a_2^*, \dots, a_n^*$ form a basis in L_0 . Let us denote, by L_Z , a Lie groupoid of all vectors in L with integer coordinates in the chosen basis. Let K be a commutative ring. Then the tensor product of L_Z and K is a Lie groupoid L_K over K . Let Γ_i be the totality of elements in K of kind $a_i^* + x$, where x is an element of the direct sum S_i of root subspaces L_r , where r is a positive root, and $a_i^*(r)$ is different from zero. We define an incidence system $ST(A, K)$, which is a disjoint union of Γ_i such that x from Γ_i and y from Γ_j are incident if and only if $[x, y] = 0$. As was shown in [3] (see also [4]) in the case of a finite-dimensional algebra L over the field K of characteristic zero (or “sufficiently large” characteristic), the incidence system $ST(A, K)$ is isomorphic to the Schubert system of the geometry of a simple group G , which is an adjoint group for the Lie algebra L . If $\det(A) = 0$, then the incidence system $ST(A, K)$ is a variety of infinite dimension (see [4]). In

the case of $K = F_q$, $ST(A, K)$ can be approximated by a finite Schubert system obtained by the change of the space L by a direct sum of root spaces L_r , where the positive root r satisfies the condition $r < r_0$ for certain r_0 and the chosen lexicographical order on roots (see [4, 5]). In a similar way, the Schubert system of the geometry of a simple Lie group of the twisted type can be embedded into the corresponding Lie algebra [6].

Let Γ , I be an incidence graph in the Schubert incidence system over a commutative ring K . Geometry elements forming two flags $F_1 = \{(M_1, f_1), (M_2, f_2), \dots, (M_s, f_s)\}$ and $F_2 = \{(M_1^+, f_1^+), (M_2^+, f_2^+), \dots, (M_s^+, f_s^+)\}$ may be located at the same connected component of I , or the representatives of F_1 and F_2 are from distinct connected components. Assume that the system of equations $G_1(x) = a_1, G_2(x) = a_2, \dots, G_k(x) = a_k$, where $a_i \in K$ are some constants, defines the connectivity invariants. For elements $x, y \in \Gamma_1$ from the same connectivity component, the relation $G_i(x) = G_i(y)$, $i = 1, 2, \dots, k$, holds.

The existence of i such that $G_i(x) = G_i(y)$ implies that x and y are vertices from different connected components of graph I .

On the flag varieties and walks on them. Finite geometries and the metric spaces connected with them are traditionally used in coding theory. Some cryptographical applications of finite geometries were proposed in [7]. The idea to use walks in a Schubert system for the generation of nonlinear bijective maps of vector spaces was proposed in [8]. The present article is devoted to generalizations of cryptographical algorithms based on a Schubert automaton proposed in [9].

Let us consider the set ΓF of maximal flags of a Schubert system. We define the spectrum $\text{spec}(F)$ of a flag $F = \{(M_1, f_1), (M_2, f_2), \dots, (M_s, f_s)\}$ as a sequence of colors $t_i = f_i | M_i - (M_1 \cup M_2 \cup \dots \cup M_{i-1} \cup M_{i+1} \cup \dots \cup M_s)$ of its elements (M_i, f_i) . We introduce the adjacency relation R on the set ΓF as the following relation (or graph): the intersection of two flags is a flag of rank $s - 1$. We refer to maximal flags satisfying relation R as adjacency flags.

If $F_1 R F_2$ for flags $F_1 = \{(M_1, f_1), (M_2, f_2), \dots, (M_s, f_s)\}$ and $F_2 = \{(M_1^+, f_1^+), (M_2^+, f_2^+), \dots, (M_s^+, f_s^+)\}$, then there exists the index i such that colors t_i and t_i^+ are distinct, and the functions f_i and f_i^+ differ by their values on $M_i - M_1 \cup M_2 \cup \dots \cup M_{i-1} \cup M_{i+1} \cup \dots \cup M_s$. As follows from the definition of Schubert systems, the operator $N_{t_i^+}^i(F)$, which maps a flag F with spectrum $(t_1, t_2, \dots, t_{i-1}, t_i, t_{i+1}, \dots, t_s)$ into the adjacent flag F^+ of color $(t_1, t_2, \dots, t_{i-1}, t_i^+, t_{i+1}, \dots, t_s)$, is well defined. Obviously, the equality $t_i = t_i^+$ implies that $N_{t_i^+}^i(F) = F$. We define the color of the edge of graph R between vertices F and F^+ as number i . The composition $N_{t_1}^{i_1} N_{t_2}^{i_2} \dots N_{t_k}^{i_k}$ for different colors $\{i_1, i_2, \dots, i_k\}$ computed for flag F corresponds to walk $F, F_1 = N_{t_1}^{i_1}(F), F_2 = N_{t_2}^{i_2}(F_1), \dots, F_k = N_{t_k}^{i_k}(F_{k-1})$ in graph R . Note that edges $FRF_1, F_1RF_2, \dots, F_{k-1}RF_k$ are colored in distinct colors. As follows from the definition of a Schubert system, the varieties of maximal flags ΓF and the color spaces $S_i = K^{M_i - M_1 \cup M_2 \cup \dots \cup M_{i-1} \cup M_{i+1} \cup \dots \cup M_s}$ are free modules over the commutative ring K .

Let Q be a subring K such that K is a free module over Q of dimension d . Then ΓF and S_i are affine spaces over Q of dimensions v and v_i , respectively. It is clear that d is a divisor of these integers. Polynomial functions $G_i: Q^v \rightarrow Q^d$ map the affine variety of flags $\Gamma F(Q)$ over the commutative ring Q into spaces A_i of dimension d . We refer to the direct sum $S(A)$ of spaces $S_i(A_i)$ as the spectral space (space of invariants) of the variety $\Gamma F(Q)$. With the maximal flag F , we associate its trace $\text{sp}(F) = (t_1, t_2, \dots, t_s, G_1(F), G_2(F), \dots, G_t(F))$, where (t_1, t_2, \dots, t_s) is the spectrum corresponding to the vector $x(F) = (x_1, x_2, \dots, x_l)$, $l = v_1 + v_2 + \dots + v_s$ from S and $(G_1(F), G_2(F), \dots, G_t(F))$ is an element from the space of invariants, which could be given

also by the vector $y(F) = (y_1, y_2, \dots, y_m)$, $m = td$. Let $f_i = f(x_1, x_2, \dots, x_l, y_1, y_2, \dots, y_m)$ be a polynomial (or birational) map from $S + A$ into S_i defined over the commutative ring, Q . Let Z be an abstract flag from the totality $\Gamma F(Q)$ with the spectrum z_1, z_2, \dots, z_l and invariants $G_1(Z), G_2(Z), \dots, G_m(Z)$. A specialization $f_i(Z) = f_i(Z_1, Z_2, \dots, Z_l, G_1(Z), G_2(Z), \dots, G_m(Z))$ associates the tuple $f_i(Z)$ from S_i with given Z . We define the symbolic code of a walk as the string $f_{i_1}, f_{i_2}, \dots, f_{i_t}$ of such maps, where the sequence i_1, i_2, \dots, i_t is such that i_s differs from i_{s+1} for each s , and t is determined by a certain function $t = T(x_1, x_2, \dots, x_l, y_1, y_2, \dots, y_m)$, which maps $S + A$ into the set Z^+ of positive integers. Let F be a flag from $\Gamma F(Q)$. First, we compute its spectrum and the set of invariants $G_1(F), G_2(F), \dots, G_t(F)$ and get the tuple $(x_1, x_2, \dots, x_l, y_1, y_2, \dots, y_m)$ (extended spectrum of the flag) from the module $S + A$. Then we compute $t = t(F)$ and $f_{i_1}(F), f_{i_2}(F), \dots, f_{i_t}(F)$ for our flag F . It allows us to compute $N = N_{t_1}^{i_1} N_{t_2}^{i_2} \dots N_{t_t}^{i_t}(F)$, where $t_{i_s} = f_{i_s}(F)$. So we get the element $F^+ = N(F)$, which is the last vertex of the computed walk in graph R . This means that the symbolic code $f_{i_1}, f_{i_2}, \dots, f_{i_t}$ of length $t = T(x_1, x_2, \dots, x_l, y_1, y_2, \dots, y_m)$ determines the map $N = N(f_{i_1}, f_{i_2}, \dots, f_{i_t})$ of $\Gamma F(Q)$ into itself. Under certain conditions, the reimage of flag F^+ under the above-described map can be computed. Obviously, the flags F^+ and F are from the same connected component of graph R . So, for the extended spectra $(x_1^+, x_2^+, \dots, x_l^+, y_1^+, y_2^+, \dots, y_m^+)$ and $(x_1, x_2, \dots, x_l, y_1, y_2, \dots, y_m)$, the following equalities hold: $y_1^+ = y_1, y_2^+ = y_2, \dots, y_m^+ = y_m$. The tuple $(x_1^+, x_2^+, \dots, x_l^+)$ is uniquely determined by the symbolic code and the spectrum of flag F . For each i , we consider the function of kind $f_{i_r}, i_r = i$, which appears in the symbolic code on the last position. If such a function really exists, we denote it by f_i^* ; if not, we assume $f_i^* = x_i$. We refer to the set $f_1^*, f_2^*, \dots, f_l^*$ as the boundary of a symbolic code. For each function f_{i_k} of the symbolic code, we denote the previous function with the index i_k by $f_{i_k}^+$, if such a function exists. If not, we assume that $f_{i_k}^+ = x_{i_k}$. It is clear that $x_i^+ = f_i^*(x_1, x_2, \dots, x_l)$ for each i . Let us assume now that the map g from S into itself shifting x_i into x_i^+ is a bijection. Then flag F^+ can be used for the computation of the spectrum $g^{-1}(x_1, x_2, \dots, x_l)$ and the set of invariants y_j of F . We can compute the length $t = T(x_1, x_2, \dots, x_l, y_1, y_2, \dots, y_m)$ and the reverse walk $F^+, F_{i_t} = N_{f_{i_t}^+}^{i_t}(F^+), F_{i_{t-1}} = N_{f_{i_{t-1}}^+}^{i_{t-1}}(F_{i_t}), \dots, F = N_{f_1^+}^{i_1}(F_1)$. Note that $\text{sp}(F^+) = (x_1^+, x_2^+, \dots, x_s^+)$, where the coordinate x_i^+ equals x_i plus the sum of all f_j for j equal to i . The simplest example of invertible functions can be obtained in the case where all functions f_i^* are linear functionals of the kind $x_1 H^{i1}(F) + x_2 H^{i2}(F) + \dots + x_l H^{il}(F) + H^0$, where H^0 and H^{is} depend only on y_1, y_2, \dots, y_m , and the matrix $H^{ij}(F), j \in \{i_1, i_2, \dots, i_l\}, i = 1, 2, \dots, l$, is invertible.

General algorithm of encryption. Let us consider the following private key encryption algorithm. Let $\Gamma F_n(K)$ be a sequence of varieties of maximal flags of Schubert systems $\Gamma_n(K)$ of rank n over finite commutative rings K of increasing order. The parameter $d = d(n)$ will stand for the dimension of the variety of maximal flags in $\Gamma F_n(K)$. Let us assume that Q is a subring of K such that a commutative ring K is isomorphic to a free module Q^m over Q . Let $\Gamma F_n(Q)$ be a set of maximal flags as a variety of dimension dm over Q . Correspondents Alice and Bob consider the variety $\Gamma F_n(K)$ as a plainspace $\Gamma F_n(K)$. A subring Q will be treated as a part of the common key. Similarly to the case of the Imai–Matsumoto multivariate cryptosystem, the key contains two bijective affine transformations L_1 and L_2 of the variety $\Gamma F_{dm}(Q)$. So, the plaintext can be identified with the string $x = (p_1, p_2, \dots, p_{dm})$ written as a row vector in the alphabet Q . The transformation $L_i: x \rightarrow xA_i + b_i, i = 1, 2$, is given by the matrix A_i of size dm and the vector b_i . We assume that the orders of transformations $T_i, i = 1, 2$, increase with the parameter n . The “nonlinear part” of the key (symbolic code) is

a “potentially infinite” sequence of pairs (i_s, f_{i_s}) , where $f_{i_s} = f(x_1, x_2, \dots, x_l, y_1, y_2, \dots, y_m)$, $s = 1, 2, \dots, N$, is a polynomial (or birational) map from $S + A$ into S_i defined as above. We assume that the boundary of the symbolic key $\{f_1^*, f_2^*, \dots, f_l^*\}$ is fixed, and the expansion of this key can be achieved by writing, from the left, a new set of initial elements. Additional requirements are inequalities $i_s \neq i_{s+1}$, which hold for each s . The key contains also three time functions $h_i = t_i(x_1, x_2, \dots, x_l, y_1, y_2, \dots, y_m)$, $i = 0, 1, 2$, which are certain maps from $S + A$ into the set of positive integers Z^+ . At the beginning, Alice applies the affine transformation L_1 to the plaintext x and gets the flag $F = L_1(x)$ written as a string over the alphabet K . Then she computes the length $h = h_0(F)$ of the nonlinear part of the symbolic key, as well as the values $f_{i_1}(F), f_{i_2}(F), \dots, f_{i_h}(F)$ of functions from the symbolic key for the obtained flag F . The next step for Alice is the computation of $N = N_{t_1}^{i_1} N_{t_2}^{i_2} \dots N_{t_h}^{i_h}(F)$, where $t_{i_s} = f_{i_s}(F)$, and she gets the last flag of computed walks $F^+ = N(F)$. The flag $L_2(F^+) = Y$ is sent to Bob via an open channel. We shall assume that the input and output data for our encryption algorithm are given in the form of tuples over the commutative ring K . The length of the sequence (i_s, f_{i_s}) is chosen in a special way, so the reimage of flag F^+ for the map N is always computable (or computable in the case of “almost all” flags). Bob gets Y and computes flag $L_2^{-1}(Y) = F^+$, which belongs to the connected component of graph R containing F . He computes numerically the invariants $G_1(F^+), G_2(F^+), \dots, G_t(F^+)$ and uses the boundary $\{f_1^*, f_2^*, \dots, f_l^*\}$ for the computation of the spectrum of F . He computes the reverse walk in the graph R for finding its initial vertex F . Finally, Bob computes $L_1^{-1}(F)$ and writes this tuple in the form of a string over the alphabet K . At the end of the communication session, the correspondents may change affine maps L_1 and L_2 for their powers $L_i^{T_i}$, $i = 1, 2$.

An example of effectively computable enciphering map. Obviously, an arbitrary linguistic graph is a Schubert structure. Let K be a finite commutative ring. Let us consider the infinite bipartite graph $D(K)$ with the point set $\Gamma_1 = P$ consisting of elements $x = (x_1, x_2, x_3, x_3^-, \dots, x_n, x_n^-, \dots)$ and the line set $\Gamma_2 = L$ consisting of lines $y = [y_1, y_2, y_3, y_3^-, \dots, y_n, y_n^-, \dots]$ with the incidence relation $I : xIy$, $x \in P$, and $y \in L$ if and only if the following two sets of relations hold:

(1) $x_2 - y_2 = y_1 x_1$, $x_3 - y_3 = x_1 y_2$, $x_4 - y_4 = y_1 x_3$, $x_5 - y_5 = x_1 y_4$, \dots , $x_n - y_n = x_1 y_{n-1}$ for odd n and $x_n - y_n = y_1 x_{n-1}$ for even n .

(2) $x_3^- - y_3^- = y_1 x_2$, $x_4^- - y_4^- = x_1 y_3^-$, $x_5^- - y_5^- = y_1 x_4^-$, \dots , $x_n^- - y_n^- = y_1 x_{n-1}^-$ for odd n and $x_n^- - y_n^- = x_1 y_{n-1}^-$ for even values of parameter n . Let us consider also the bipartite graph $D(n, K)$ defined on the set of points $P_n = K^n$ and lines $L_n = K^n$ in the following way: vectors x_n and y_n from P_n and L_n , are identified with the projections of the infinite tuples $x \in P$ and $y \in L$ into their n initial coordinates, x_n and y_n are connected by an edge if and only if the first $n - 1$ relations from the definition of incidence of x and y hold. In the case $K = F_q$, the family of graphs $D(n, K) = D(n, q)$ together with special induced subgraphs was defined in [10]. In that paper, some extremal properties of these graphs were investigated. For the general commutative rings, the simplest properties of $D(n, K)$ and $CD(n, K)$ were considered in [11].

The most general connectivity properties of graphs $CD(n, K)$ were obtained in [12]. The discrete dynamical systems corresponding to these families of graphs were studied in [13]. If the characteristic of a commutative ring K equals 2, then the graph $CD(n, K)$ simply coincides with the connected component of $D(n, K)$. Note that all connected components of $D(n, K)$ are isomorphic. The partition sets P_n and L_n of the graph $CD(n, q)$ can be identified with K^t , where $t = [3/4n] + 1$ for $n = 0, 2, 3 \pmod{4}$ and $t = [3/4n] + 2$ for $n = 1 \pmod{4}$.

It is known that there exist m quadratic invariants a_1, a_2, \dots, a_m where $m = [1/4n] - e$ with $e = -1$ for $n = 0, 2, 3 \pmod{4}$ and $e = 0$ in the remaining case such that, for two points (or lines) x and y of the graph $D(n, q)$ from the same connected component, the equalities $a_1(x) = a_1(y)$ and $a_2(x) = a_2(y), \dots, a_m(x) = a_m(y)$ hold. The inequality $a_i(x) \neq a_i(y)$ for some i implies that x and y are vertices from distinct connected components.

In the case of characteristic 2, the above-written conditions uniquely define the partition into connected components. Colors of point $(x) = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ and line $[y] = [y_1, y_2, \dots, y_n]$ are just the first coordinates x_1 and y_1 of these tuples. The flag $(x), [y], (x)I[y]$ of this linguistic graph is uniquely determined by coordinates of point (x_1, x_2, \dots, x_n) and color y_1 of line $[y]$.

Let us assume that the commutative ring K is a free module Q^r over another ring Q , and the multiplication of K is a quadratic map of $K \times K$ into K over Q . The natural example is the Kronecker extension of the ring Q , i.e. $K = Q[x]/g(x)$, where $g(x) \in Q[x]$ is some polynomial.

Let us consider the above-described algorithm in the case of a symbolic key $x_1 + d_1, y_1 + d_1^+, \dots, x_l + d_l, y_1 + d_l^+$ of even variative length $2l, l = T(x, y_1)$ (in the case of odd length $2l + 1$, one can use the symbolic key $(x_1 + d_1, y_1 + d_1^+, \dots, x_l + d_l, y_1 + d_l^+, x_l + d_{l+1})$), where the function T is obtained from the map $f(z_1, z_2, \dots, z_r, z_{r+1}, z_{r+2}, \dots, z_{2r}, z_{2r+1}, z_{2r+2}, \dots, z_{r(m+2)})$ from the set $Q^{r(m+2)}$ into Z^+ by the specialization $(z_1, z_2, \dots, z_{r(m+2)}) = (x_1^+, x_2^+, \dots, x_r^+, y_1^+, y_2^+, \dots, y_r^+, a_{11}, a_{12}, \dots, a_{1r}, a_{21}, a_{22}, \dots, a_{2r}, \dots, a_{m1}, a_{m2}, \dots, a_{mr})$, where $(x_1^+, x_2^+, \dots, x_r^+)$ and $(y_1^+, y_2^+, \dots, y_r^+)$ are coordinates of the flag xIy written in the chosen base of $K = Q^r$, and $(a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{ir}), i = 1, 2, \dots, m$, are the coordinates of the invariant values $a_1(x), a_2(x), \dots, a_m(x)$ of the point x from the flag. Let the flag from K^{n+1} be defined by the vector v of the free module $Q^{r(n+1)}$. Let L_1 and L_2 be two invertible affine transformations of the plainspace $Q^{r(n+1)}$. We assume that they are a part of the key of our symmetric algorithm. For simplification, we assume that the length of a symbolic key is an odd number.

Let us denote, by N , the composition of maps $N_{x_1+d_1}, N_{y_1+d_1^+}, N_{x_2+d_2}, N_{y_2+d_2^+}, \dots, N_{x_l+d_l}, N_{y_l+d_l^+}$. The encryption consists of the following steps:

(a) application of the affine map L_1 to the plainspace v , the resulting vector $L_1(v)$ from $Q^{r(n+1)}$ have to be written as a vector u from the free module over the extension K of Q .

(b) the computation of the vector $w = N(u)$ and its presentation by the vector w^+ in the chosen base of $Q^{r(n+1)}$.

(c) computation of the vector $z = L_2(w^+)$. The deciphering is the reverse process. The correspondent (Bob) receives the ciphertext z in the form of a vector from $Q^{r(n+1)}$. He computes L_2^{-1} and writes this vector as a element w from K^{n+1} . Then Bob defines $u = N^{-1}(w)$ and writes the result in the form of a vector u^+ with coordinates from Q . For the determination of the plainspace v , he writes $L_1^{-1}(u^+)$ in the form of an element from K^{n+1} .

On the properties of an encryption map It turns out that, independently of the choice of sequences d_1, d_2, \dots, d_l and $d_1^+, d_2^+, \dots, d_l^+$, the transformation N is a polynomial map of kind $(x_1, x_2, \dots, x_n) \rightarrow (f_1(x_1, x_2, \dots, x_{n+1}), f_2(x_1, x_2, \dots, x_{n+1}), \dots, f_n(x_1, x_2, \dots, x_{n+1}))$, where all polynomials $f_i(x_1, x_2, \dots, x_{n+1}), i = 1, 2, \dots, n, n + 1$, are cubic (see [15] and references therein). This means that both the encryption map $E = L_1NL_2$ and the inverse map $E^{-1} = L_1^{-1}N^{-1}L_2^{-1}$, together with the inverse map $E' = L_2'N'L_1'$ are cubic transformations. Recall that E^{-1} corresponds to d_1, d_2, \dots, d_l and d_1', d_2', \dots, d_l' written in the inverse order.

Let us assume that a fixed key is in multiple use, and the adversary has an access to some plaintext and can obtain a rather large set of pairs of the plaintext-ciphertext kind. In this case,

the fact that the degree of the polynomial inverse map is bounded by 3 makes the linearization attacks feasible. In fact, the key can be computed in a polynomial time. The above-written condition is not a realistic one. So, the cubic encryption map was used for the protection of real communication networks for various rings.

First, the algorithms were used in the case of prime finite fields (e. g., Z_{127}). Then the arithmetical rings Z_{2^n} , $n = 7, 8, 16, 32$, and the Galois fields F_{2^n} for $n = 7, 8, 16, 32$, were used. The attractive side of the encryption algorithm is its speed (complexity $O(nl)$), resistance against attacks without access to plaintexts. In the case of $l \leq [n/2] + 2$ and $K = F_q$, the different sequences d_i ($d_i \neq d_{i+1}$), d_i^+ , ($d_i^+ \neq d_{i+1}^+$, $i = 1, 2, \dots, l$) give different ciphertexts. The generalizations of this fact to the case of arbitrary commutative rings are given in [13]. Computer simulations (see surveys [14], [15] and references therein) in the case of a special choice of affine transformations demonstrate that the encryption function has strong mixing properties. It satisfies the well-known Madryga's requirements: change of one character in the plaintext or in the key leads to a change of the vast majority characters of the ciphertext if the alphabet K is used.

The enciphering algorithm with the key of variative length described in the example given above allows one to increase the level of resistance of an encryption against attacks with an access to some plaintexts without essential change of the robustness and the mixing quality.

The dependence of the length function l on a plainspace makes classical linearization attacks impossible.

Let us show that the complexity of the known difficult discrete logarithm problem can serve as a security argument for the algorithm. Assume that the sequences d_i and d_i^+ , $i = 1, 2, \dots, l$, are periodic. This means that there exists r such that $l = rj$, $d_{i+r}^+ = d_i^+$, $d_{i+r} = d_i$. Additionally, we assume that $L_1 = L^{2^{-1}}$ and the parameter r is constant. Let $G = L_1 N^+ L_2$, where the map $N^+ = N_{x_1+d_1} N_{y_1+d_1^+} N_{x_2+d_2} N_{y_2+d_2^+} \cdots N_{x_r+d_r} N_{y_r+d_r^+} L_2$ is computed with the use of some computer algebra program. The resulting polynomial transformation G will be written as $(x_1, x_2, \dots, x_n) \rightarrow (g_1(x_1, x_2, \dots, x_{n+1}), g_2(x_1, x_2, \dots, x_{n+1}), \dots, g_n(x_1, x_2, \dots, x_{n+1}))$, where each polynomial $g_i(x_1, x_2, \dots, x_{n+1})$, $i = 1, 2, \dots, n + 1$, is a cubic expression given by a list of monomials in lexicographical order. So, the value of G at the given point will be computed in the time bounded by $O(n^4)$. Note that the order of a map G coincides with the order of N^+ . As follows from the above-written facts, each power of the map G in the symmetric group $S(K^n)$ is a cubic map or the identity. Let M be a multiplicative subset of the commutative ring K . This means that M is closed under multiplication and does not contain zero. If all $d_i + d_{i+1}$, $d_i^+ + d_{i+1}^+$, $i = 1, 2, \dots, l$, and $d_1 + d_l$, $d_1^+ + d_l^+$ are elements of M , then the order of the transformation G tends to infinity with the growth of the parameter n . The increase of the map order is going on with the increase of the characteristic of the ground ring (see [13] and references therein).

Recall that, in our case, the correspondents use the periodic map $G = G_r$, and the length function l is a function of the plainspace, which can generally has any value. We assume that the adversary can get many pairs (p, c) , where p is a plaintext, and c is a corresponding ciphertext.

Additionally, we assume that the basic polynomial G is known to the adversary. The natural attack on the key can be conducted via the investigation of the equation $G^z(p) = c$ with the known tuples p and c and the unknown positive integer z . So, we get the discrete logarithm problem

for the cyclic subgroup generated by G . We have to solve the equation $G^z = H$, where H is some function transforming p into c . The opponent could not solve this problem in the case of a sufficiently large number of variables, because the order of G is increasing, but the degree of the right-hand side is still cubic. The investigation of iterations of G brings no additional data for the investigation of the discrete logarithm problem. The adversary can determine G^{-1} by computing many pairs of kind $(v, G(v))$ and by conducting a linearization attack. The computation of the unknown functions $l = l(x)$, $j(x) = l(x)/r$, and $G^{-j}(x)$ is related to the above-mentioned discrete logarithm problem with the base G . Note that the function $j(x)$ can be very sophisticated, for instant, defined as a specialization of the known Matijasevich polynomial.

The author expresses his sincere gratitude to Professor Richard Weiss (Boston) for his constant support of the idea to use geometries over diagrams for the problems of informational defence and a stimulating lecture course at the University of Maria Curie Skłodowska in Lublin.

1. *Buekenhout F.* Handbook of incidence geometry. – Amsterdam: North-Holland, 1995. – 1399 p.
2. *Ustimenko V.* Maximality of affine group and hidden graph cryptosystems // *J. Alg. Discr. Math.* – 2005. – No 1. – P. 133–150.
3. *Ustimenko V.* Linear interpretations for flag geometries of Chevalley groups // *Ukr. Mat. Zh.* – 1990. – **42**, No 3. – P. 383–387.
4. *Ustimenko V.* On the varieties of parabolic subgroups, their generalisations and combinatorial applications // *Acta Appl. Math.* – 1998. – **52**. – P. 223–238.
5. *Ustimenko V.* Small Schubert cells as subsets in Lie algebras // *Funct. Analysis and Appl.* – 1991. – **25**, No 4. – P. 81–83.
6. *Ustimenko V.* Geometries of twisted groups of Lie type as objects of linear algebra // *Questions of Group Theory and Homological Algebra.* – Yaroslavl: Yaroslavl State Univ., 1990. – P. 33–56 (in Russian).
7. *Beutelspachera A.* Enciphered geometry. Some applications of geometry to cryptography // *Ann. of Discr. Math.* – 1988. – **37**. – P. 59–68.
8. *Ustimenko V.* Graphs with special arcs and cryptography // *Acta Appl. Math.* – 2002. – **74**, No 2. – P. 117–153.
9. *Ustimenko V.* Schubert cells in Lie geometries and key exchange via symbolic computations // *Albanian J. of Math.* – 2010. – **4**, No 4. – P. 135–145.
10. *Lazebnik F., Ustimenko V. A., Woldar A. J.* New series of dense graphs of high girth // *Bull. (New Series) of AMS.* – 1995. – **32**, No 1. – P. 73–79.
11. *Ustimenko V.* Coordinatisation of trees and their quotients // *Voronoj's Impact on Modern Science.* – Kiev: Institute of Mathematics of the NASU, 1998. – **2**. – P. 125–152.
12. *Ustimenko V.* Algebraic groups and small world graphs of high girth // *Albanian J. of Math.* – 2009. – **3**, No 1. – P. 25–33.
13. *Ustimenko V., Romanczuk U.* On dynamical systems of large girth or cycle indicator and their applications to multivariate cryptography // *Artificial Intelligence, Evolutionary Computing and Metaheuristics.* – Berlin: Springer, 2013. – P. 257–285.
14. *Ustimenko V.* On the cryptographical properties of extreme algebraic graphs // *Algebraic Aspects of Digital Communications*, edited by T. Shaska, E. Hasimaj. – Amsterdam: IOS Press, 2009. – P. 256–281.
15. *Ustimenko V.* On the extremal graph theory for directed graphs and its cryptographical applications // *Advances in Coding Theory and Cryptography*, edited by T. Shaska, W. C. Huffman, D. Joyner, V. Ustimenko. – Singapore: World Scientific, 2007. – **3**. – P. 181–200.

*Institute of Telecommunications
and Global Information Space, the NAS of Ukraine, Kiev
University of Maria Curie Skłodowska, Poland*

Received 02.09.2013

В. А. Устименко

О блужданиях переменной длины в системах инцидентности Шуберта и полиномиальном потоковом шифровании

Предложен алгоритм потокового шифрования, основанный на блужданиях на многообразиях флагов системы Шуберта, определенной над коммутативным кольцом. Примером системы Шуберта является ограничение отношений инцидентности геометрии простой группы Ли нормального типа на объединение больших клеток максимальной размерности. Более общие примеры соответствуют группам Каца–Муди. Приведен пример использования таких симметричных алгоритмов, определенных на периодических блужданиях, для создания публичного ключа, безопасность которого связана с проблемой дискретного логарифма для циклических подгрупп полиномиальных преобразований возрастающего порядка.

В. О. Устименко

Про блукання змінної довжини в системах інцидентності Шуберта та поліноміальному струменевому кодуванні

Запропоновано алгоритм струменевого кодування, що ґрунтується на блуканнях на многовидах прапорів системи Шуберта, визначеної над комутативним кільцем. Прикладом системи Шуберта є обмеження відношень інцидентності геометрії простої групи Лі нормального типу на об'єднання великих клітин максимального виміру. Більш загальні приклади пов'язані з групами Каца–Муді. Наведено приклад використання таких струменевих алгоритмів, визначених на періодичних блуканнях, для створення відкритого поліноміального ключа, безпека якого пов'язана з проблемою дискретного логарифма для циклічних підгруп поліноміальних перетворень зростаючого порядку.



УДК 534

В. Л. Крупенин, К. Б. Мягкохлеб

Об одном классе авторезонансных машин виброударного действия

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

Рассмотрен механизм организации авторезонансных технологических машин виброударного действия, основанный на организации цепи обратной связи, включающей измерение импульсов удара рабочего органа, который является интегралом движения в соответствующей консервативной модели процесса. Приводятся примеры и даются расчетные формулы. Указано, что подобные принципы организации машин могут быть построены и при измерении других интегралов движения.

Рассмотрим в качестве примера модель одного класса авторезонансных машин виброударного действия [1]. Следуя методикам, предложенным в [2–4], представим исследуемый объект как линейную систему с произвольным числом степеней свободы (рис. 1), содержащую рабочий орган в виде твердого тела массой m .

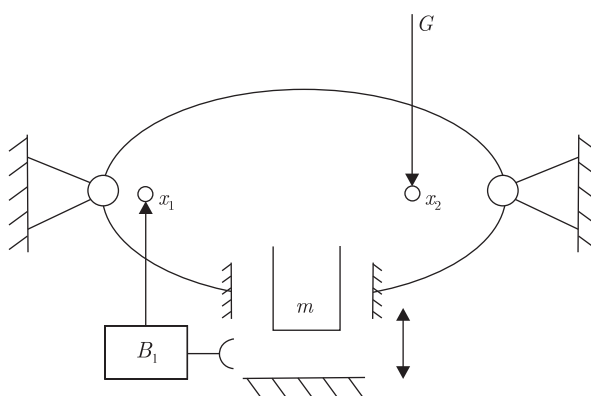


Рис. 1. Объект — линейная система с произвольным числом степеней свободы

© В. Л. Крупенин, К. Б. Мягкохлеб, 2014

Будем предполагать, что в результате построения математической модели или в результате натуральных измерений известна система операторов динамической податливости [2, 3], полностью определяющих линейную часть системы. Рабочий процесс заключается в организации периодических соударений между рабочим органом и неподвижным ограничителем (обрабатываемой поверхностью).

Пусть координата рабочего органа массой m , совершающего одномерные колебания, есть x . Пусть, далее, в точке x_1 приложена постоянная сила G , обеспечивающая прижим рабочего органа к ограничителю, в точке x_2 приложено управляющее силовое воздействие B_1 , вид которого нужно указать, исходя из конструктивных особенностей авторезонансной системы. Это воздействие, очевидно, формируется при помощи организации цепи обратной связи. Вблизи точки контакта рабочего органа с ограничителем помещен датчик, измеряющий какие-либо параметры его движения. Управляющее воздействие формируется в соответствии с сигналом датчика.

Приводя внешние силы к точке x , можно записать уравнение движения в операторной форме

$$x(t) = L_1(0)G + L_2(p)B_1 - L(p)\Phi(x, x_t), \quad (1)$$

где $\Phi(x, x_t)$ — сила ударного взаимодействия [2, 3]; индексация по независимой переменной обозначает дифференцирование; $L_n(p)$ — оператор из точки x_n в точку x (при этом, если $x_n \equiv x$, то индекс опускается); $p \equiv d/dt$ — оператор дифференцирования.

Удар предполагается абсолютно упругим; потери энергии при рабочем процессе могут быть учтены, например, введением соответствующих составляющих в представление для оператора $L(p)$ [2–5]. Предполагается также, что все преобразователи, входящие в систему, работают безынерционно.

В отсутствие трения и управляющего воздействия уравнение движения консервативной системы, отвечающей (1), будет иметь вид

$$\ddot{x}(t) = L_1(0)G - L_{10}(p)\Phi(x, x_t), \quad (2)$$

где для операторов $L_{n0}(p)$ предполагается, что $\text{Im } L_{n0}(i\omega) = 0$, $\text{Re } L_{n0}(i\omega) = \text{Re } L_n(i\omega)$.

Пусть $x_0 \equiv L_1(0)G$. Периодический режим с одним соударением за период движения консервативной системы (T_0) в предположении, что начало отсчета времени совмещено с ударом, имеет вид [2, 3]:

$$x(t) = x_0 - J\chi(\omega_0, t), \quad \omega_0 = \frac{2\pi}{T_0}, \quad (3)$$

где периодическая функция Грина (ПФГ), отвечающая оператору $L_{10}(p)$, дается рядом Фурье [2, 3]

$$\chi(\omega_0, t) = T_0^{-1} \sum_{k=-\infty}^{\infty} L_{10}(ik\omega_0) \exp(ik\omega_0 t). \quad (4)$$

Импульс удара в данном случае дается соотношением:

$$J = 2m|x_t(-0)| \geq 0 \quad (5)$$

и определяется из условия совместности [2, 3] $x(0) = \Delta$, где Δ — величина зазора или предварительного натяга. Из соотношения (5) получаем

$$J = \frac{x_0 - \Delta}{\chi(\omega_0, 0)}. \quad (6)$$

Импульс удара J в консервативной виброударной системе оказывается интегралом движения, взаимно-однозначно связанным с полной энергией E . Наша авторезонансная система будет организована так, что обратная связь будет построена в результате фиксации значений какого-либо из интегралов движения. Будет показано, что это весьма удобный способ организаций авторезонансных машин виброударного действия.

Частотные диапазоны существования решения (3), (6) определяются в конкретных случаях из условия $x(t) \leq \Delta$. На практике проверяют выполнение условия $J \geq 0$, что в большинстве случаев равносильно.

Соотношение (5) определяет уравнение скелетной кривой $J = J(\omega_0)$.

Перепишем уравнение движения (1), используя оператор динамической жесткости $L^{-1}(p)$ [2, 3, 5]:

$$\begin{aligned} L^{-1}(p)x &= G_x + B(p; x) - \Phi(x, x_t), \\ G_x &= L^{-1}(0)L_1(0)G, \\ B(p; x) &= L^{-1}(p)L_2(p)B_1. \end{aligned} \quad (7)$$

Будем строить управляющее воздействие $B(p; x)$ таким, чтобы в исходной системе (1) можно было реализовать периодический автоколебательный режим движения, который сохранял бы форму режима движения консервативной системы (3).

Пусть $L^{-1}(p) = W_1(p) + W_2(p)$, причем $\text{Im } W_1(i\omega) = \text{Re } W_2(i\omega)$. Решение (5) построено в предположении $W_2(p) \equiv 0$. Внесем представление (3) в соотношение (7) при некотором значении частоты ω_0 , удовлетворяющему условию $x(t) \leq \Delta$, и найдем в результате

$$W_2(p)[x_0 - J\chi(\omega_0, t)] = B[p; x_0 - J\chi(\omega_0, t)]. \quad (8)$$

Будем далее искать вид функции $B(p; x)$ в классе функций со структурой $\{K(J)W(p)\}$, где $K(J)$ — некоторая дифференцируемая на любом конечном отрезке функция; $W(p)$ — мероморфная функция комплексного переменного p . Принимая во внимание, что $W_2(p)x_0 = 0$, из соотношения (8) находим:

$$W_2(p)[-J\chi(\omega_0, t)] = K(J)W(p)[-J\chi(\omega_0, t)]. \quad (9)$$

Таким образом, должно быть

$$W(p) = W_2(p), \quad K(J) = 1. \quad (10)$$

Итак, получены условия, определяющие вид управляющего воздействия B . Из уравнения $K(J) = 1$ можно определить стационарные значения импульса J^0 , а из обращения уравнения скелетной кривой $J(\omega)$ — частоты автоколебаний. Выберем, для определенности, $K(J) = K_0 J^{-1}$, $K_0 = \text{const} > 0$. Тогда $J^0 = K_0$ и частоты автоколебаний определяются из соотношения $K_0 = J(\omega)$.

Найденные решения надо исследовать на устойчивость. В инженерных расчетах часто используют так называемое энергетическое условие [2, 3, 5]. Строго говоря, энергетическое условие является лишь необходимым. Эффективность использования этого условия в прикладных задачах широко известна [2–5].

Составим функцию $E(J)$, отвечающую балансу работ неконсервативных сил за период движения T

$$E(J) = -J^2 \int_0^T [W_2(p)\chi(t) - K(J)W_2(p)\chi(t)]p\chi(t) dt. \quad (11)$$

После преобразований получаем

$$(J) = -J^2\lambda[1 - K(J)], \quad \lambda = \text{const} > 0. \quad (12)$$

Для асимптотически устойчивых периодических режимов при стационарном значении интеграла движения (в данном случае импульса удара) силы диссипации стабилизируют систему и поэтому в соответствии с энергетическим условием $dE/dJ < 0$ (при $J = J^0$). В соответствии с вычисленным

$$\frac{dE}{dJ} = J^2\lambda \frac{dK}{dJ}. \quad (13)$$

При $dK/dJ < 0$ автоколебания оказываются устойчивыми. В случае, когда $K(J) = K_0/J$, $dK/dJ = -K_0J^{-2}$. Стационарное значение $J^0 = K_0 > 0$ и режим асимптотически устойчив. Более точно анализ устойчивости может быть выполнен при помощи других современных методов.

С технической точки зрения, организация подобного режима позволяет при минимуме энергетических затрат добиться максимальной эффективности процесса. Вопрос о практической реализации такой установки представляет собой самостоятельную проблему. Можно указать несколько путей ее решения. Важные рекомендации можно найти в [4].

В качестве важного примера рассмотрим систему с одной степенью свободы (рис. 2).

Линейный осциллятор совершает колебания с соударениями о неподвижный ограничитель 2, на котором установлен датчик импульсов удара, формирующий сигнал, пропорциональный J . Этот сигнал преобразуется в некоторую функцию $K(J)$, которая после перемножения с сигналом, поступающим с датчика скорости 1, подается на возбудитель колебаний 4.

Считая массу ударника единичной, уравнение движения запишем в виде

$$(p^2 + \Omega^2 + 2bp)x = -\Phi(x, x_t) + K(J)px, \quad (14)$$

где $b > 0$ — коэффициент вязкого демпфирования. В силу того, что рассматривается система с зазором, сила $G = 0$. В консервативном случае ($b = K = 0$) решение (3), (5) имеет вид [5]:

$$\begin{aligned} x(t) &= -J\chi(t), \\ \chi(t) &= \left[2\Omega \sin \frac{\Omega T_0}{2} \right]^{-1} \cos \Omega \left(t - \frac{T_0}{2} \right), \\ J &= -2\Omega \operatorname{tg}(\pi\Omega\omega_0^{-1}). \end{aligned} \quad (15)$$

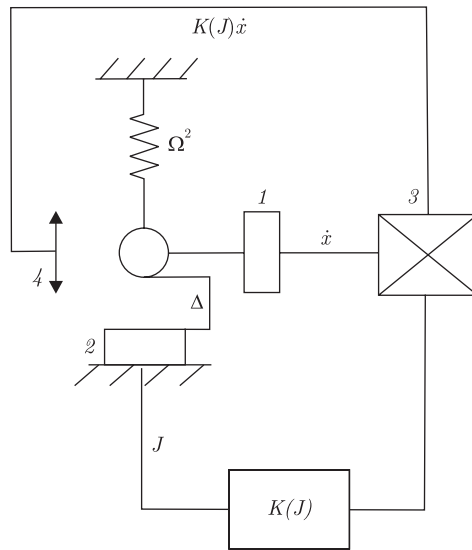


Рис. 2. Система с одной степенью свободы

Указанное во второй формуле (15) конечное представление для периодической функции Грина имеет место только для $t \in [0, T]$, а для всех $t \in \mathbf{R}$ это представление должно быть продолжено по периодичности. Диапазон собственных частот системы $\Omega \leq \omega < 2\Omega$. В данном случае

$$W_1(p) = p^2 + \Omega^2, \quad W_2(p) = 2bp.$$

При $K(J) = K_0 J^{-1}$ стационарное значение импульса удара $J^0 = K_0/2b$.

Решение сохраняет вид, описываемый первой формулой (15). В соответствии с третьей формулой (15), частота автоколебаний $\omega^0 = \pi\Omega\{\pi - \arctg[K_0/(4b\Omega\Delta)]\}^{-1}$. Найденный режим асимптотически устойчив [5].

Следует заметить, что организация рассматриваемых машин требует, очевидно, жесткого запуска [2, 3] виброударного процесса, так как для организации фиксации ударных импульсов процесс должен начаться.

При помощи частотно-временных методов [2, 3, 5] аналогично могут быть исследованы и системы более высокой размерности. Кроме того, могут быть использованы и другие интегралы движения.

Учет потерь энергии при ударе может быть выполнен при помощи “поправки” в коэффициенте вязкого трения [5] $b = b_1 + r\pi^{-1}\Omega$, где b_1 — “истинный” коэффициент вязкого трения; $r = 1 - R$, R — коэффициент восстановления ($0 < R \leq 1$).

Рассмотренная система обладает замечательным свойством сохранять форму режима движения консервативной системы. Такие системы называются псевдоконсервативными [6].

Следует заметить, что принципы авторезонансного построения виброударных систем могут быть использованы при проектировании специальной виброиспытательной аппаратуры [7, 8].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты №№ 13-08-01235а, 13-08-90419 Укр_ф_а) и ГФФИУ (проект № Ф53.7/038).

1. Крупенин В. Л. Ударные и виброударные машины и устройства // Интернет-журн. “Вестник научно-технического развития” (vntr.ru). – 2009. – № 4(20). – С. 3–32.

2. *Бабицкий В. И., Крупенин В. Л.* Колебания в сильно нелинейных системах. – Москва: Наука, 1985. – 320 с.
3. *Vabitsky V. I., Krupenin V. L.* Vibration of strongly nonlinear discontinuous systems. – Berlin: Springer, 2001. – 404 p.
4. *Асташев В. К., Бабицкий В. И., Вульфсон И. И. и др.* Динамика машин и управление машинами. – Москва: Машиностроение, 1988. – 240 с.
5. *Веприк А. М., Крупенин В. Л. и др.* Широкополосные виброударные генераторы механических колебаний. – Ленинград: Машиностроение, 1987. – 76 с.
6. *Krupenin V. L.* To the calculation of pseudo-conservative self-oscillation vibroimpact systems // Письма в интернет-журн. “ВНТР” (vntr.ru). – 2010. – No 12(40). – P. 32–33.
7. *Божско Е. А., Крупенин В. Л., Мягкохлеб К. Б.* Математическая модель и структурная схема трехкоординатной системы возбуждения вибраций электромагнитного типа // Интернет-журн. “Вестник научно-технического развития” (vntr.ru). – 2013. – № 6(70). – С. 3–9.

Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки “Институт машиноведения
им. А. А. Благовраова” РАН, Москва, Россия
Институт проблем машиностроения
им. А. Н. Подгорного НАН Украины, Харьков

Поступило в редакцию 11.09.2013

В. Л. Крупенін, К. Б. Мягкохліб

Про один клас авторезонансних машин віброударної дії

Розглянуто механізм організації авторезонансних технологічних машин віброударної дії, оснований на організації ланцюга зворотного зв'язку, що включає вимірювання імпульсів удару робочого органу, який є інтегралом руху у відповідній консервативній моделі процесу. Наведено приклади і даються розрахункові формули. Зазначено, що подібні принципи організації машин можуть бути побудовані і при вимірюванні інших інтегралів руху.

V. L. Krupenin, K. B. Myagkohlub

On a class of autoresonant machines of vibro-impact action

The mechanism of organization of autoresonant vibro-impact technological machines is described. It involves a feedback loop, which includes the measurement of pulses hitting the working body, which is the integral of a conservative movement within the corresponding model. Examples and the calculation formulas are given. It is indicated that similar principles of organization of machines can be developed at the measurement of other integrals of motion.

Н. И. Ободан, Е. Ф. Прокопало, В. А. Громов

Устойчивость и закритическое поведение двухслойных цилиндрических оболочек с частичным “неприклеем” при осевом сжатии

(Представлено академиком НАН Украины Я. М. Григоренко)

Исследуются критические нагрузки и закритическая деформация двухслойной цилиндрической оболочки при условии наличия области “неприклея”. Установлено, что процесс потери устойчивости происходит в два этапа: локальная потеря устойчивости в области “неприклея” и общая потеря устойчивости — потеря несущей способности.

Технология изготовления двухслойных оболочек допускает наличие областей “неприклея”, которые при наличии усилий сжатия могут приводить в указанной области к локальной потере устойчивости как одного слоя, так и обоих слоев вместе, что приводит к существенному снижению несущей способности тонкостенной конструкции. При этом учет эффекта локальной потери устойчивости возможен только при использовании нелинейной модели. Современные исследования [1–8], как правило, посвящены линейному либо нелинейному анализу тонкостенных систем с расслоениями в докритической стадии (до первой предельной точки), экспериментальные исследования связаны с идентификацией области расслоения.

1. Исследуется деформация двухслойной цилиндрической оболочки, подвергнутой действию равномерного осевого сжатия, при наличии прямоугольной в плане области “неприклея” (двух диаметрально противоположно расположенных областей); торцы оболочки закреплены. Оболочка характеризуется радиусом R , длиной L , толщиной h , область “неприклея” — толщинами верхнего (h_2) и нижнего (h_1) слоев; x_1 , x_2 соответствуют продольному и окружному направлениям соответственно. В области (областях) “неприклея” предполагается существование прямоугольных в плане подобластей нормального контакта и раздельного деформирования слоев. Рассматривается вариационная постановка нелинейной краевой задачи теории оболочек аналогичная, обобщенная на случай многослойности (с использованием гипотезы ломаной нормали) [8], с дополнительными условиями. Рассматриваемая постановка является вариационной задачей с неизвестной границей подобластей нормального контакта и раздельного деформирования слоев. Для решения данной задачи в рамках вариационной постановки в качестве независимо варьируемых функций используются отыскиваемые в рамках итерационного процесса функции одной переменной $U_s^{(i_1)}(x_1)$ и $U_s^{(i_2)}(x_2)$, такие, что $U_s(x_1, x_2) = U_s^{(i_1)}(x_1)U_s^{(i_2)}(x_2)$, где $i_1 = i$, $i_2 = i - 1$ для четных i (номер итерации), $i_1 = i - 1$, $i_2 = i$ — для нечетных; здесь $U(x_1, x_2) = \{U_s(x_1, x_2), s = \overline{1, S}\}$ — вектор неизвестных функций задачи. Из условий стационарности соответствующего функционала следуют: 1) системы обыкновенных дифференциальных уравнений относительно функций $U_s^{(i_1)}(x_1)$ ($U_s^{(i_2)}(x_2)$) с коэффициентами, содержащими интегралы от функций $U_s^{(i_2)}(x_2)$ ($U_s^{(i_1)}(x_1)$) и их производных; 2) на границах неповреж-

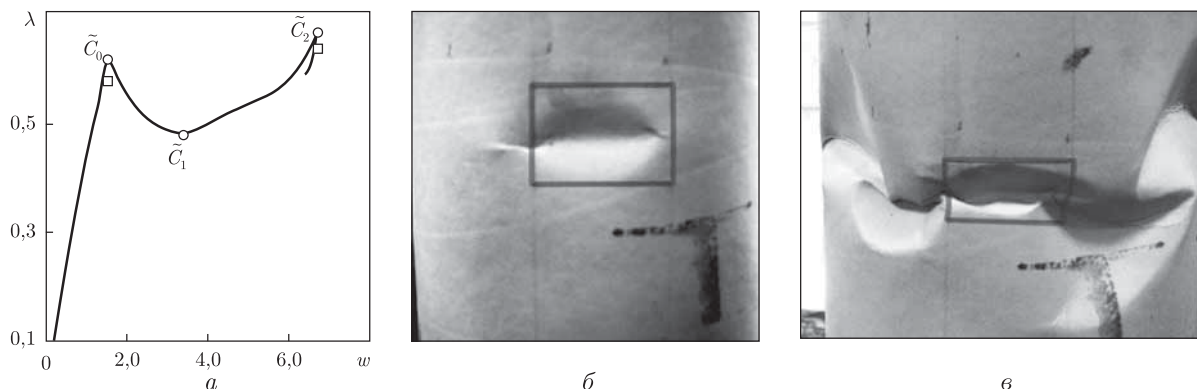


Рис. 1. Потеря устойчивости оболочки с областью “неприклея”: *a* — полученная в расчете зависимость нагрузка–прогиб; *б, в* — полученные в эксперименте локальная и общая формы потери устойчивости соответственно

денной части оболочки и прилегающей к ней подобласти контакта: интегральные условия совместности по обобщенным по соответствующей границе деформациям; 3) интегральные условия равновесия по обобщенным тангенциальным усилиям и изгибающим моментам; на границах подобластей контакта и раздельного деформирования слоев: условия 2, 3; 4) интегральные условия равновесия по обобщенным перерезывающим силам, сформулированные с учетом скачков по обобщенным перерезывающим силам на указанных границах; 5) внутри и на границах подобластей нормального контакта слоев: условие непроникновения слоев; 6) условия трансверсальности для определения границ подобластей; 7) на торцах оболочки: граничные условия. Решения одномерных задач строятся итеративно сведением на каждой итерации краевой задачи к задаче Коши методом Ньютона, неизвестная граница входит в число неизвестных; для обеспечения сходимости алгоритма применялся метод продолжения по параметру.

2. С помощью разрешающих соотношений 1–7 выполнялся численный анализ рассматриваемой задачи. На рис. 1, *a* приведены результаты расчета для двухслойной оболочки, жестко закрепленной по криволинейным контурам, у которой $h_1 = h_2 = 0,23 \cdot 10^{-3}$ м, $L = 7,5 \cdot 10^{-2}$ м, $R = 3,75 \cdot 10^{-2}$ м; значения модулей упругости: $E_{x_1} = 4,45 \cdot 10^9$ Па (вдоль образующей); $E_{x_2} = 2,15 \cdot 10^9$ Па (вдоль направляющей) и коэффициентов Пуассона $\mu_{x_1} = 0,31$, $\mu_{x_2} = 0,15$. Направления x_1 , x_2 соответствуют главным направлениям ортотропии материала. Выбор параметров оболочки обусловлен условиями проведенного эксперимента. На торцах оболочки выполнялись условия жесткого заземления. Длина области (областей) “неприклея” в продольном направлении составляла $a_{x_1} = 2,5 \cdot 10^{-2}$ м; в окружном направлении — $a_{x_2} = 3,5 \cdot 10^{-2}$ м; указанная область (области) “неприклея” расположена на равном удалении от торцов оболочки. По оси абсцисс на рис. 1 отложен характерный прогиб w , по оси ординат — значение параметра нагружения λ . На данном и последующих рисунках величина параметра нагружения отнесена к величине критической нагрузки, полученной для соответствующей оболочки без области “неприклея”. Из рис. 1 видно, что процесс нелинейного деформирования протекает в две стадии — практически линейная деформация до достижения λ_{loc} (особая точка \tilde{C}_0), а затем — участок нелинейного деформирования с достижением критической λ_{gen} (особая точка \tilde{C}_2). При достижении первой предельной точки λ_{loc} реализуется форма потеря устойчивости с одной вмятиной и совместной деформацией слоев, при достижении λ_{gen} — “пояс” локальных вмятин. Из со-

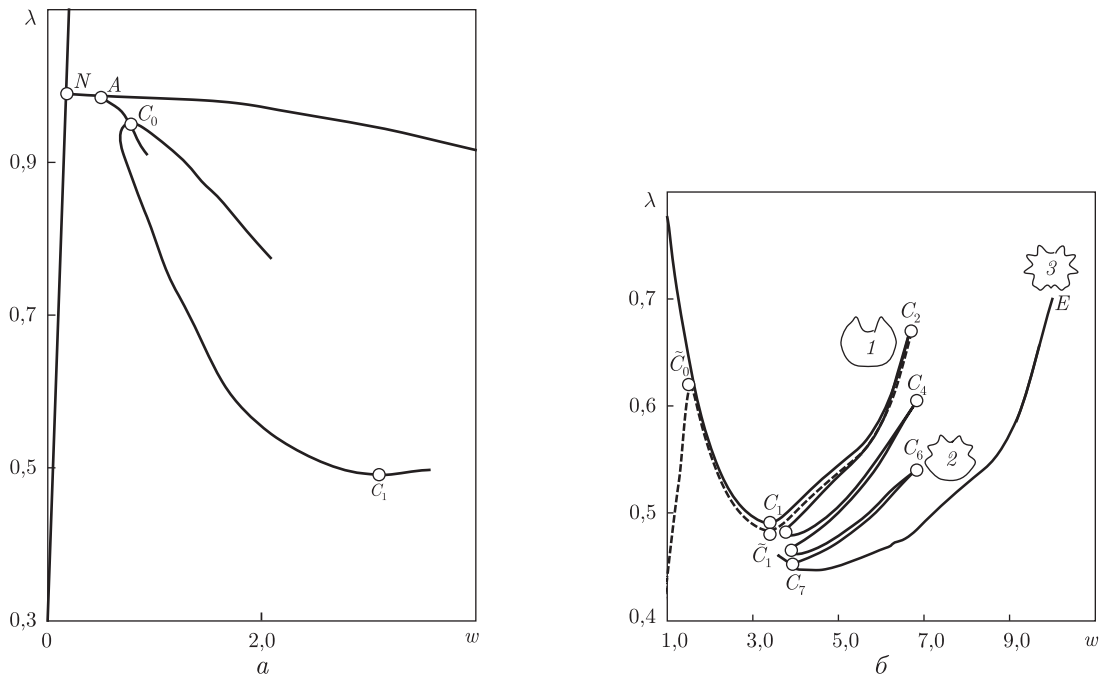


Рис. 2. Характерная структура ветвления для оболочки без повреждений: *a* — фрагмент общей бифуркационной картины; *б* — ветви с формами деформации одна/несколько локальных вмятин и “пояс” вмятин

поставления кривой деформирования (рис. 1) и общей картины ветвления для полностью склеенной цилиндрической оболочки (рис. 2) следует, что кривая на рис. 1, *a* реализуется путем разрушения общей картины ветвления за счет появления возмущений в виде области “неприклея”. На рис. 2, *a* представлен фрагмент указанной структуры: здесь участку ветви $N - A$ соответствуют регулярные формы деформации; участку ветви $A - C_0$ — формы деформации вида “пояс” вмятин; участку ветви $C_0 - C_1$ — формы деформации одна или несколько локальных вмятин. Рис. 2, *б* демонстрирует участок ветви локальных форм и участок ветви с формой вида “пояс” вмятин ($C_7 - E$).

3. В качестве экспериментальной модели рассматривается двухслойная цилиндрическая оболочка, выполненная из чертежной бумаги. Геометрические размеры и свойства материала оболочки соответствуют приведенным в п. 2 величинам. Длина области (областей) “неприклея” в продольном направлении составляла $a_{x_1} = 2,5 \cdot 10^{-2}$ м; в окружном изменялась от $a_{x_2} = 1,5 \cdot 10^{-2}$ м до $5 \cdot 10^{-2}$ м. Было испытано две серии по $18 = 6 \times 3$ оболочек в каждой: первая серия с одной областью “неприклея”, вторая — с двумя. При возрастании нагружения во всех испытаниях наблюдалась (как и в расчете) следующая картина деформирования: при $\lambda = \lambda_{loc}^{exp}$ (рис. 1, *б*) происходила локальная потеря устойчивости в виде одной локальной вмятины в области “неприклея” без потери несущей способности, при дальнейшем увеличении нагрузки до $\lambda = \lambda_{gen}^{exp}$ происходила общая потеря устойчивости с образованием “пояса” вмятин на уровне зоны “неприклея” (рис. 1, *в*). На рис. 3 представлены результаты анализа влияния размеров зоны “неприклея” на значения λ_{loc}^{exp} (квадраты) и λ_{gen}^{exp} (кружочки), полученные в эксперименте и в расчете (сплошные кривые). Рис. 3, *a* соответствует одной области “неприклея”, рис. 3, *б* — двум: критические нагрузки как локальной, так и общей потери устойчивости для практически возможного диапазона размеров области “неприклея” лежат в границах области существования локальных форм.

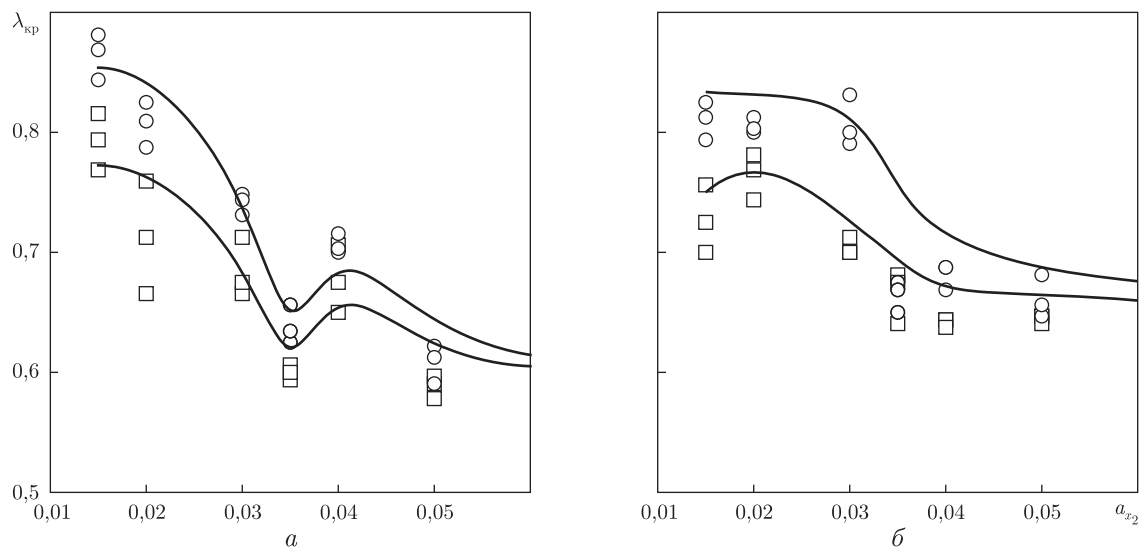


Рис. 3. Зависимость критических нагрузок от величины области “неприклея”: *а* — одна область “неприклея”; *б* — две области “неприклея”

Необходимо отметить, что одинаковые значения толщин верхнего и нижнего слоев, реализованные в экспериментальной части исследования, не позволили получить форму потери устойчивости с выщелкнутым слоем.

1. Моссаковский В. И., Ободан Н. И., Железко И. П. Нелинейная модель деформирования оболочек с расслоениями // Докл. АН СССР. – 1985. – **282**, № 5. – С. 1070–1073.
2. Hosseini-Toudeshky H., Hosseini S., Mohammadi B. Delamination buckling growth in laminated composites using layerwise-interface element // Composite Structures. – 2010. – **92**. – P. 1846–1856.
3. Fu Y., Li S., Mao Y. The analysis of interlaminar stresses for composite laminated shallow shells with interfacial damage // Acta Mech. Solida Sinica. – 2011. – **24**, No 6. – P. 539–554.
4. Cao Y.-P., Jia F., Zhao Y. et al. Buckling and post-buckling of thin film resting on an elastic graded substrate // Int. J. of Solids and Structures. – 2012. – **49**. – P. 1656–1664.
5. Malgaca L. Integration of active vibration control methods with finite element models of smart laminated composite structures // Composite Structures. – 2010. – **92**. – P. 1651–1663.
6. Muc A., Stawiarski A. Identification of damages in composite multilayered cylindrical panels with delaminations // Composite Structures. – 2012. – **94**. – P. 1871–1879.
7. Салганик Р. Л., Устинов К. Б. Задача о деформировании упруго заделанной пластины, моделирующей отслоившееся от подложки покрытие (плоская деформация) // Изв. РАН. МТТ. – 2012. – № 4. – С. 50–62.
8. Tian Y., Fu Y., Mao Y. Nonlinear static/dynamic analysis for elasto-plastic laminated plates with interfacial damage evolution // Composite Structures. – 2010. – **93**. – P. 103–112.

Н. І. Ободан, Є. Ф. Прокопало, В. О. Громов

Стійкість та закритична поведінка двошарових циліндричних оболонок із частковим “неприклеєм” при дії осьового стискання

Досліджено критичні навантаження та закритичну деформацію двошарової циліндричної оболонки за умов наявності області “неприклею”. Встановлено, що процес втрати стійкості відбувається в два етапи: локальна втрата стійкості в області “неприклею” та загальна втрата стійкості — втрата несучої здатності.

N. I. Obodan, E. F. Prokopalo, V. A. Gromov

Stability and postcritical behavior of two-layer cylindrical shells with non-adherence area subjected to axial compression

Critical loads and postbuckling behavior for an axially compressed two-layered cylindrical shell with non-adherence area are considered. It is revealed that the loss of stability proceeds in two phases: a localized deformed shape emerges in the non-adherence area site following by the general loss of stability (loss of load-carrying capability).



УДК 001.893.530.1

О. І. Мриглод, Р. Кенна, Ю. В. Головач, Б. Берш

Про порівняння екстенсивної та інтенсивної мір ефективності наукових груп

(Представлено академіком НАН України В. М. Локтевим)

Піднімаються проблеми, пов'язані із оцінюванням наукової ефективності. Розглядаються екстенсивні та інтенсивні міри для оцінювання загальної сили та усередненого показника якості роботи наукових колективів. Адже, з одного боку, досі немає однозначних критеріїв та підходів для аналізу наукової ефективності. З іншого боку, при формалізації процедури оцінювання важливо врахувати відмінності різних галузей науки. Обговорюються результати перевірки кореляції між експертними оцінками та показниками на основі цитованості для британських наукових груп, що працюють у різних дисциплінах.

Однією з характерних рис сучасної науки є те, що кількісні методи досліджень, які виникли і сформувалися в природничих науках, все більше поширюються на науки суспільні і гуманітарні [1]. Більше того, предметом досліджень стає сама наука, що породило порівняно нову галузь — наукометрію [2]. Доступні нині великі обсяги наукометричних даних зручно аналізувати за допомогою методів та інструментарію інших дисциплін, таких як наука про складні системи [3], теорія випадкових графів [4], соціофізика [5] тощо. У задачах соціофізики для розгляду складних соціальних систем застосовуються не лише методи, а й понятійний апарат, що виник при вивченні фізичних систем (переважно, об'єктів статистичної фізики). Зокрема, при аналізі наукових груп для розгляду їх структури використовується теорія складних мереж [6], а при дослідженні ефективності їх роботи застосовуються методи і концепції теорії фазових переходів [7]. У нашій роботі мова йтиме про ефективність роботи наукових колективів та методи її оцінювання. Ключовим спостереженням, на якому базується наш аналіз, є відмінність між інтенсивними та екстенсивними характеристиками цієї ефективності.

Хоча питання про оцінювання наукового доробку досліджується здавна, проте як тривіальні методи простого підрахунку (статей, грантів тощо), так і сучасний кількісний аналіз наукометричних даних наразі не дають змоги вивести узагальнений показник, який би

© О. І. Мриглод, Р. Кенна, Ю. В. Головач, Б. Берш, 2014

однозначно та коректно відображав різні аспекти наукової роботи. Більше того, навіть найновіші методи автоматичного збору даних страждають від багатьох недоліків, а бази даних є неповними. Безумовно, існує ще перевірений часом метод експертної оцінки, який і досі вважається найбільш надійним (див., наприклад [8]). Прикладом є незалежне рецензування рукописів у наукових виданнях. Проте і цей метод піддається критиці через, скажімо, вплив суб'єктивних факторів на кінцевий висновок [9]. Крім того, проведення масштабної експертної процедури вимагає значного часу та затрат. Таким чином, жоден із можливих підходів до оцінювання наукової ефективності не може вважатися досконалим, проблема балансування між надійністю та простотою неодноразово піднімається як у наукометричній спільноті, так і на рівні приватних чи державних організацій, що займаються рейтингуванням та/або управлінням у сфері науки. Існує думка, що найкращим вирішенням є комбіноване використання наукометричних показників та рецензування [10].

Нижче ми розглядаємо проблему взаємної кореляції наукометричних показників та експертних оцінок. Зокрема, ставиться питання про те, чи можна передбачити експертні висновки про роботу наукових груп на основі даних про цитованість їх публікацій, а отже, чи взаємозамінними є ці два підходи. Продовжуючи наші дослідження [11–13], у цій роботі ми акцентуємо увагу на особливостях окремих галузей науки.

Постановка задачі та деякі означення. Для досліджень наукової якості та впливу використаємо інтенсивні та екстенсивні міри — концепції, запозичені із статистичної фізики. У цьому контексті термін “екстенсивний” використовується для опису загальних характеристик системи, що залежать від її розміру, тоді як “інтенсивні” значення відповідають усередненим показникам. Надалі, ведучи мову про оцінювання наукової групи, будемо використовувати два типи показників: *відносні* (інтенсивні), що можуть розглядатися як коефіцієнт ефективності групи, тобто усереднені за кількістю її членів N , та *абсолютні* (екстенсивні), що характеризують ефективність групи в цілому і є пропорційними до її розміру N . Обидві характеристики дослідницьких колективів є важливими та широко використовуються на практиці: відносні значення ефективності лягають в основу рейтингів та дають змогу порівняти між собою установи або групи різного розміру; натомість, розподілення коштів або ресурсів відбувається пропорційно до абсолютних значень. Очевидно, що ці два типи показників є взаємозалежними і можуть бути одержані шляхом множення/ділення на N .

У фізиці екстенсивні та інтенсивні величини, відповідно, позначаються великими та малими літерами. У своїй роботі ми також слідуємо цій традиції. Використовуючи термінологію із попередніх робіт [11–15], відносний показник на основі експертної оцінки ефективності наукового колективу називатимемо *якістю* s , а загальну, абсолютну оцінку якості — його *силою* S (від англ. strength)

$$S = sN, \tag{1}$$

де N — кількість членів групи. Відповідно, відносний показник, що базується на основі підрахунку одержаних цитувань, називатимемо *середнім впливом* групи i (від англ. impact), тоді як *загальний вплив* I буде відповідати абсолютному значенню

$$I = iN. \tag{2}$$

Вибір таких найменувань змінних пояснюється тим, що рівень цитованості тієї чи іншої наукової публікації інтерпретується як вплив на подальші наукові дослідження, ступінь

використання опублікованих результатів в інших роботах. З іншого боку, більш широке значення слова “якість” скоріше співвідноситься із експертною оцінкою, яка враховує різні аспекти роботи.

Метою роботи є порівняння між собою відносних (s та i) та абсолютних (S та I) показників. Ідеально скорельовані значення мали б лягти на пряму лінію і означали б, що результати експертного оцінювання можуть бути легко передбачені на основі даних про цитування і навпаки. Більше того, у такому дослідженні можна враховувати розміри груп, шукаючи кореляцію не для всіх, а для окремо взятих великих, середніх або малих груп — ці та інші питання, пов’язані із розміром групи та залежністю від нього ефективності групи, досліджувалися у роботах [14, 15].

Використані дані. Очевидно, що одержані результати будуть залежати від кожної окремої вибірки даних, адже у різних країнах по-різному організовано наукові дослідження та неоднаково відбувається розвиток галузей науки. В даному випадку дослідження проводилося на основі даних про ефективність наукових груп у вищих навчальних закладах Великобританії. Це обумовлено тим, що саме там існує багаторічна традиція проведення централізованої процедури оцінювання ефективності наукових та освітніх закладів — Research Assessment Exercise (RAE) (офіційна сторінка RAE 2008 року: <http://www.rae.ac.uk/>). Починаючи з 1986 р., кожні три–п’ять років організовується масштабна робота з оцінювання та рейтингування навчальних закладів (відсоток дослідних інститутів є малим, натомість основна кількість досліджень здійснюється саме у ВНЗ). Згідно із правилами, кожна установа, що претендує на одержання фінансової підтримки від держави, подає відомості про своїх працівників, які відносяться до різних тематичних груп або так званих модулів — units of assessment (UOA). У поданні вказується інформація про вибрані чотири (або менше) публікації кожного науковця, отримані гранти, присвоєні нагороди, кількість студентів та аспірантів, взаємозв’язки із виробництвом, доступні технічні ресурси тощо. Залучені до RAE експерти аналізують кожне подання і формують профіль якості для всіх наукових груп, визначаючи, яка частка їх результатів відноситься до кожного із п’яти рівнів якості: 4* — найвищий рівень якості у світовому масштабі; 3* — високий міжнародний рівень якості; 2* — міжнародний рівень; 1* — національний рівень; Unclassified — низький рівень якості або невідповідність опублікованим критеріям RAE. Таким чином, кожній науковій групі присвоюється власний профіль якості, що складається із набору п’яти цифр. Наприклад, результуючий профіль для групи з біології (UOA 14) Університету Кембриджа з $N = 213,69^1$: 20 (4*); 40 (3*); 30 (2*); 5 (1*); 5 (Unclassified). Оприлюднені профілі якості RAE використовуються для розрахунку так званої формули розподілу коштів, які щорічно виділяє Спеціальна рада Англії з питань фінансування вищої освіти — “Higher Education Funding Council for England” (HEFCE). Зокрема, безпосередньо після завершення попередньої процедури RAE у 2008 р. формула мала вигляд:

$$s = p_{4*} + \frac{3}{7}p_{3*} + \frac{1}{7}p_{2*}, \quad (3)$$

де p_{n*} — це значення із загального профіля якості, що припадає на рівень n . Саме результуюче значення s використовується нами як відносний показник якості наукової групи. Відповідно, значення сили легко розраховується множенням на N , яке вказується на

¹ N може набувати дробових значень, якщо частина членів групи працюють не на повну ставку — тоді їх враховують лише частково.

веб-сторінці RAE разом із відповідним профілем. Наприклад, для згаданої вище біологічної групи Університету Кембриджа значення s буде приблизно дорівнювати 41,429, i , відповідно, $S = s \cdot 213,69 \approx 8852,87$.

Для того щоб одержати показник ефективності для тієї ж вибірки наукових груп, але вже на основі даних про цитованість, було використано дані приватної компанії Evidence, що ввійшла до складу Thomson Reuters Research Analytics (офіційна сторінка: <http://www.evidence.co.uk>). Використовуючи базу даних Web of Science, для кожної групи, що зробила подання до RAE 2008 р., компанією Evidence були розраховані значення так званого нормалізованого впливу цитувань — normalised citation impact (NCI). Особливістю цього показника є нетривіальна процедура нормування, що дає змогу компенсувати відмінності у цитованості для різних галузей науки, різних видань або навіть різних проміжків часу. Отже, *середній вплив* групи i визначається нормованими значеннями цитованості статей, що підсумовуються та усереднюються на кількість членів групи. Відповідно, значення *загального впливу* I легко одержується з (2).

Порівняння відносних (s та i) та абсолютних (S та I) показників було здійснено для наукових груп Великої Британії із семи галузей науки: біологія (UOA 14), хімія (UOA 18), фізика² (UOA 19), інженерія (UOA 28), географія та науки про навколишнє середовище (UOA 32), соціологія (UOA 41), історія (UOA 62).

Обговорення результатів. Наведені у табл. 1 результати (див. також [11–13]) свідчать про те, що між відносними показниками ефективності наукових груп кореляція існує, проте лише помірна: для жодної із проаналізованих дисциплін коефіцієнт лінійної кореляції Пірсона r не перевищує 0,7. Між рейтингами наукових груп, що побудовані на основі s та i , також існує лише незначна кореляція з коефіцієнтом Спірмена $\rho \approx 0,59$ в кращому випадку [12].

Тоді як відносні показники ефективності наукових груп s та i корелюють не дуже сильно, їх абсолютні відповідники S та I виявляються добре скорельованими, як це також чітко видно із табл. 1. Це означає, що з великою долею ймовірності *сила* наукової групи відповідає її *загальному впливу*. Очевидно, що рейтингування за абсолютними значеннями позбавлене сенсу, проте можна оцінити пропорційний внесок кожного колективу.

В табл. 1 також можна простежити відмінності у значеннях коефіцієнтів кореляції між абсолютними показниками для груп з різних дисциплін: хоча у всіх випадках вони є високими, проте найкраще S та I корелюють для природничих галузей науки ($r \geq 0,95$), таких як біологія, хімія та фізика. Дещо нижчим ($r \approx 0,87$) коефіцієнт кореляції є для історії та соціології як гуманітарних дисциплін, а проміжних значень ($r \approx 0,94$) набуває для інженерії та географії. Останнє може пояснюватись тим, що в інтерпретації RAE географія є сильно міждисциплінарною наукою, як, зрештою, й інженерія. Щоб перевірити це спостереження, на рис. 1 і 2 наведено графіки залежності як відносних, так і абсолютних показників окремо для груп із точних, гуманітарних та міждисциплінарних галузей. З рис. 1 бачимо, що дійсно між s та i існує однакова позитивна тенденція, проте рівень скорельованості є невисоким. Добра ж скорельованість абсолютних показників S та I для всіх груп дисциплін продемонстрована візуально на рис. 2.

Таким чином, одержані у роботі результати ще раз підтверджують, що усереднені показники впливу наукових груп (інтенсивні величини), які базуються на підрахунку цитувань,

²В інтерпретації RAE “фізика”, в основному, включає експериментальні дослідження, тоді як теоретичні дослідження часто аналізуються разом із прикладною математикою.

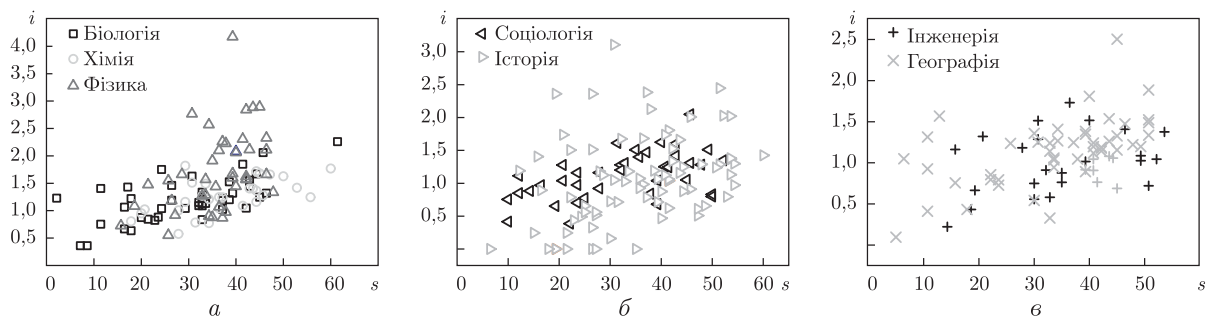


Рис. 1. Залежність між відносними показниками s та i для наукових груп в галузях: a — точних; b — гуманітарних та v — міждисциплінарних наук. Дані про різні дисципліни наведені різними символами

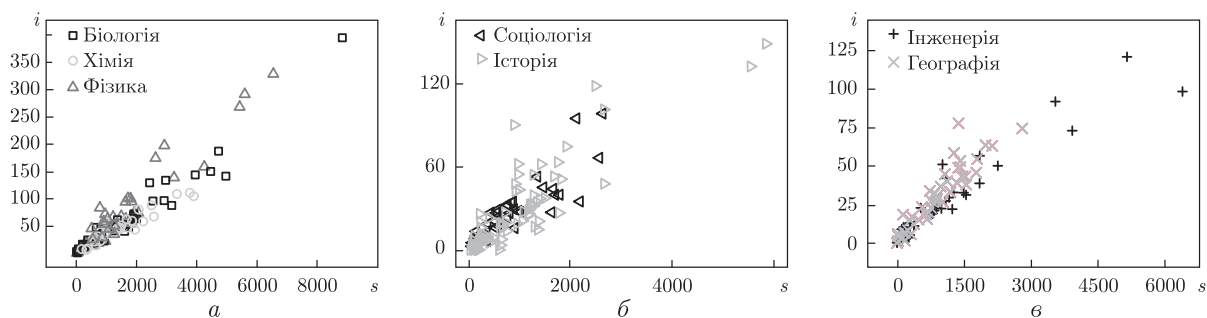


Рис. 2. Залежність між абсолютними показниками S та I для наукових груп в галузях: a — точних; b — гуманітарних та v — міждисциплінарних наук. Дані для різних дисциплін наведені різними символами

не можуть добре відтворити експертні оцінки якості. Відповідно, можна стверджувати, що результати рейтингування установ на основі нормалізованого підрахунку цитувань будуть відрізнятися від результатів рейтингування на основі висновків рецензентів. З іншого боку, при бажанні оцінити пропорційні внески від наукових груп різного розміру (екстенсивні величини) можна з високою долею впевненості використати дані про їх цитованість. Цей висновок справедливий для всіх ділянок науки, проте найкраще працює у випадку саме точних наук, для яких статті у періодичних виданнях є традиційною формою публікації наукових результатів. Значна, проте все ж слабша кореляція між абсолютними оцінками спостерігається для сектора гуманітарних наук, які, по-перше, найслабше представлені

Таблиця 1. Значення коефіцієнтів кореляції між відносними (s та i) та абсолютними (S та I) показниками ефективності для наукових колективів Великої Британії з різних дисциплін

| Дисципліна | Коефіцієнт Спірмена ρ для порівняння рейтингів (лише на основі s та i) | Коефіцієнт лінійної кореляції Пірсона r | | | |
|----------------------|---|---|-------------|---|-------------|
| | | для груп з відповідної дисципліни | | для декількох дисциплін (узагальнені дані) | |
| | | s vs. i | S vs. I | s vs. i | S vs. I |
| Біологія (див. [11]) | 0,57 | 0,64 | 0,97 | 0,48 | 0,94 |
| Хімія | 0,59 | 0,58 | 0,95 | | |
| Фізика | 0,52 | 0,46 | 0,96 | | |
| Соціологія | 0,50 | 0,51 | 0,87 | 0,36 | 0,87 |
| Історія | 0,38 | 0,35 | 0,87 | | |
| Інженерія | 0,25 | 0,30 | 0,94 | 0,45 | 0,91 |
| Географія | 0,58 | 0,57 | 0,93 | | |

у базі даних Web of Science, а, по-друге, мають значну частку публікацій у підручниках, монографіях або інших специфічних формах видань (ноти для музики, методичні матеріали для педагогіки тощо).

Дослідження проведено в рамках проектів “Динаміка і кооперативні явища в складних фізичних і біологічних середовищах” (7-ма Рамкова угода, FP7-PEOPLE, IRSES project N269139) та “Статистична фізика у різноманітних реалізаціях” (7-ма Рамкова угода, FP7-PEOPLE, IRSES project N295302).

1. *Lazer D. et al.* Computational social science // *Science*. – 2009. – **323**. – P. 721–723; *Castellano C., Fortunato S., Loreto V.* Statistical physics of social dynamics // *Rev. Mod. Phys.* – 2009. – **81**. – P. 591–646.
2. *Добров Г. М.* Наука о науке. – Киев: Наук. думка, 1989. – 304 с.
3. *Encyclopedia of complexity and systems science* / Ed. by R. A. Meyers]. – Berlin: Springer, 2009. – 10370 p.
4. *Diestel R.* Graph theory. – Berlin: Springer, 2005. – 410 p.
5. *Galam S.* Sociophysics: A Physicist’s modeling of psycho-political phenomena. – New York: Springer. – 2012. – 439 p.
6. *Головач Ю., фон Фербер К., Олемської О., Головач Т., Мриглюд О. та ін.* Складні мережі // *Журн. фіз. досліджень*. – 2006. – **10**. – С. 247–291.
7. *Order, disorder and criticality. Advanced problems of phase transition theory* / Yu. Holovatch (ed). – Singapore: World Scientific, 2004. – Vol. 2. – 2007. – Vol. 3. – 2012. – 248 p.
8. *van Raan A. F. J.* Fatal attraction: Conceptual and methodological problems in the ranking of universities by bibliometric methods // *Scientometrics*. – 2005. – **62**, No 1. – P. 133–143.
9. *Bornmann L.* The Hawthorne effect in journal peer review // *Ibid.* – 2012. – **91**. – P. 857–862.
10. *De Bellis N.* Bibliometrics and citation analysis: from the science citation index to cybermetrics. – Lanham: Scarecrow Press, 2009.
11. *Mryglod O., Kenna R., Holovatch Yu., Berche B.* Absolute and specific measures of research group excellence // *Scientometrics*. – 2013. – **95**, No 1. – P. 115–127.
12. *Mryglod O., Kenna R., Holovatch Yu., Berche B.* Comparison of a citation-based indicator and peer review for absolute and specific measures of research-group excellence // *Ibid.* – 2013. – **97**, No 3. – P. 767–777.
13. *Мриглюд О., Кенна Р., Головач Ю., Берш Б.* Про вимірювання наукової ефективності // *Вісн. НАН України, прийнято до друку*. – Препринт ІФКС НАН України № 13. – 02U: <http://www.icmp.lviv.ua/sites/default/files/preprints/pdf/1302U.pdf>).
14. *Kenna R., Berche B.* The extensive nature of group quality // *Europhys. Lett.* – 2010. – **90**. – P. 58002.
15. *Kenna R., Berche B.* Critical mass and the dependency of research quality on group size // *Scientometrics*. – 2010. – **86**, No 2. – P. 527–540.

*Інститут фізики конденсованих систем
НАН України, Львів
Університет Ковентрі, Велика Британія
Інститут фізики конденсованих систем
НАН України, Львів
Університет Лотарингії, Нансі, Франція*

Надійшло до редакції 04.09.2013

О. И. Мрыглод, Р. Кенна, Ю. В. Головач, Б. Бэрш

О сравнении экстенсивных и интенсивных мер эффективности научных групп

Поднимаются проблемы, связанные с оценением научной эффективности. Рассматриваются экстенсивные и интенсивные меры для оценивания общей силы и усредненного показателя качества работы научных коллективов. Ведь, с одной стороны, до сих пор не существует однозначных критериев и подходов для анализа научной эффективности. С другой стороны, при формализации процедуры оценивания важно учитывать отличия разных отраслей науки. Обсуждаются результаты проверки корреляций между экспертными оценками и показателями на основе цитируемости для британских научных групп, которые работают в разных дисциплинах.

O. I. Mryglod, R. Kenna, Yu. V. Holovatch, B. Berche

On the comparison of extensive and intensive measures of the efficiency of scientific groups

The problem of scientific efficiency evaluation is discussed. On the one hand, there is no simple but reliable way to assess the individual or collective scientific performance. It is a challenge to decide which approach, i. e. peer-review or citation-based indicators, should be used for this purpose. On the other hand, differences between the disciplines should be taken into account for the assessment. We analyze correlations between values of citation-based impact indicators and peer-review scores for British scientific groups in several academic disciplines, from natural to social sciences and humanities.

Э. Д. Прохоров, О. В. Боцула, О. А. Реутина

Эффективность генерации планарных диодов $n^+ - n - n^+$ с туннельными границами

(Представлено академиком НАН Украины В. М. Яковенко)

Рассматриваются диоды $n^+ - n - n^+$ с туннельными или резонансно-туннельными боковыми границами. Одной боковой границей такого диода является полуизолирующая подложка GaAs, на которой выращен n -слой. На противоположной боковой границе может располагаться туннельная или резонансно-туннельная граница конечной протяженности. Исследуются вольт-амперные и энергетические характеристики таких диодов в широком диапазоне частот мм-диапазона. Показано, что диоды $n^+ - n - n^+$ с туннельными или резонансно-туннельными боковыми границами обладают отрицательной дифференциальной проводимостью в широком диапазоне частот мм-диапазона и могут быть использованы для генерации и усиления. Продемонстрировано, как влияет местоположение и протяженность боковых границ на энергетические и частотные характеристики диода.

Принцип работы диодов с туннельными (ТГ) и резонансно-туннельными границами (РТГ) в “сэндвич”- и планарном вариантах изложен в работе [1]. Энергетические и частотные характеристики диодов в “сэндвич”-варианте достаточно полно исследованы, в том числе с учетом междолинного переноса электронов [2]. Планарный вариант диода с боковыми границами изучен в меньшей мере. Конфигурации планарных диодов довольно сложные, распределения электрических полей и токов в структурах двумерные. Это осложняет точное описание как параметров диодов, так и их вольт-амперных и частотных характеристик.

Рассматриваемая структура диода показана на рис. 1. Внешнее напряжение U_0 прикладывается между анодом и катодом (А–К). Боковая граница представляет собой туннельный диод, включенный в прямом направлении, или резонансно-туннельный диод. Боковая граница электрически соединена с анодом. При увеличении напряжения на структуре растут ток через А–К и ток через боковую границу. Когда ток через боковую границу достигнет максимума и начнет уменьшаться, то уменьшается и ток через всю структуру. В результате вольт-амперная характеристика (ВАХ) будет обладать участком отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП) и такая структура может быть использована для генерации и усиления. В планарной структуре боковая граница может быть малой по протяженности по сравнению с длиной канала и может быть сравнима с длиной канала А–К. В любом случае различные точки границы будут находиться под разными потенциалами, и через них будут протекать разные токи. Суммарная ВАХ будет определяться всеми точками боковой границы.

Целью настоящей работы является исследование вольт-амперных характеристик и эффективности генерации планарного диода с боковыми границами конечных размеров.

Диод с боковой ТГ ограниченной протяженности. Планарный вариант диода, выполненного на эпитаксиальной пленке n -GaAs, выращенной на полуизолирующей подложке, и его эквивалентная схема показаны на рис. 1, б. Схема упрощенная, но позволяющая оценить основные соотношения между напряжениями и токами в планарной структуре.

© Э. Д. Прохоров, О. В. Боцула, О. А. Реутина, 2014

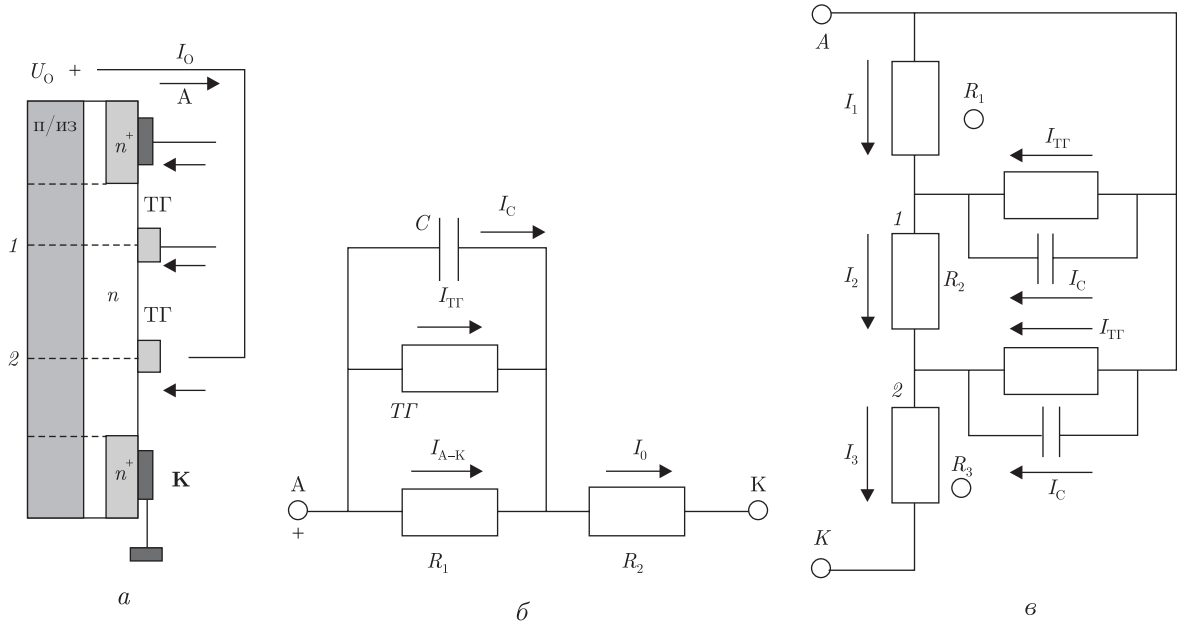


Рис. 1. Планарная структура диода (а) и ее эквивалентная схема для одной боковой границы (б) и двух боковых границ (в)

Упрощение заключается в том, что ТГ с такими же параметрами, как в “сэндвич”-варианте [3, 4], подключается в сечение канала, показанное штриховыми линиями на рис. 1 (двухмерная задача переходит в одномерную). ТГ может быть соединена с любой точкой на длине канала (штрихи на рис. 1, а), и сопротивление канала R_2 от этой точки до катода l_2 может меняться от долей до единиц Ом.

Для одной ТГ эквивалентная схема структуры (рис. 1, б) представляет собой проводимость ТГ, параллельно которой включена емкость ТГ — C и часть канала R_1 . Последовательно с ними включена часть канала R_2 между ТГ и катодом. Ток проводимости ТГ $I_{ТГ}(U)$ может быть записан точно [5, 6] или в виде следующей аппроксимации [7, 8]:

$$I_{ТГ}(U) = I_{\max} \frac{U}{U_{\max}} \exp\left(1 - \frac{U}{U_{\max}}\right) + I_{\min} \exp(A(U - U_{\min})) + I_s \exp\left(b \frac{eU}{kT} - 1\right), \quad (1)$$

где I_{\max} — максимальный туннельный ток через диод при напряжении U_{\max} ; I_{\min} — минимальный ток через диод при напряжении U_{\min} ; A — постоянная, характерная для конкретного полупроводникового материала; b — показатель роста диффузионного тока через переход; I_s — ток насыщения туннельного перехода без учета туннелирования (здесь U — напряжение на ТГ, емкости и R_1).

Зависимость тока через структуру $I_0(U_0)$ от напряжения на структуре U_0 запишется в виде

$$I_0(U_0) = \frac{U_0 - I_0 R_2}{R_1} + I_{ТГ}(U_0 - I_0(U_0) R_2) + (U_0 - I_0(U_0) R_2) \frac{1}{Z_C}. \quad (2)$$

Здесь первое слагаемое — ток через сопротивление R_1 , второе — ток ТГ, третье — емкостный ток.

Решая трансцендентные уравнения (2), находим ВАХ структуры в планарном варианте при постоянном R_2 . По ВАХ определяются максимальная ОДП и эффективность генерации (КПД).

Материалом канала могут быть полупроводники, которые обладают нелинейной зависимостью скорость–поле $v(E)$, поэтому и сопротивления канала будут зависеть от поля в канале. Во всем канале $R = R_1 + R_2$ на основе GaAs дрейфовая скорость электронов имеет вид [7, 8]

$$v\left(\frac{U}{l}\right) = \frac{\mu_n(U/l) + v_S(U/U_p)^4}{1 + (U/U_p)^4}, \quad (3)$$

где v_S — дрейфовая скорость насыщения в GaAs (приблизительное значение 10^7 см/с); U_p — пороговое напряжение.

В части канала напряженности могут быть выше пороговой и здесь необходимо учитывать зависимости $v(E)$ в виде (3) или рассчитывать эти зависимости на рабочих частотах методом Монте-Карло [9].

Расчеты ВАХ, КПД и импеданса показали, что активная и реактивная составляющие импеданса зависят от местоположения границы между катодом и анодом.

Импеданс рассматриваемой структуры равен

$$\operatorname{Re} Z = \frac{R_2(1 - GR_1)^2 + (\omega C)^2 R_1^2 R_2 + R_1(1 - GR_1)}{(1 - GR_1)^2 + (\omega C)^2 R_1^2}, \quad (4)$$

$$\operatorname{Im} Z = -\frac{\omega C R_1^2}{(1 - GR_1)^2 + (\omega C)^2 R_1^2}. \quad (5)$$

При смещении ТГ к аноду меняется ВАХ: увеличивается напряжение U_{\max} , соответствующее I_{\max} , увеличивается U_{\min} , соответствующее I_{\min} , уменьшается I_{\max} и увеличивается I_{\min} ; изменяется максимальная ОДП ($-G$).

Реальная ВАХ диода с ТГ при прямом смещении и активная составляющая импеданса построены при следующих параметрах: материал GaAs, $n = 10^{16}$ см $^{-3}$, $\mu_n = 7000$ см 2 /(В·с), $S_1 = 10^{-6}$ см 2 , $l = 10^{-4}$ см, $R_1 \approx 10$ Ом, $I_{\max} = 0,2$ А, $U_{\max} = 0,1$ В, $I_S = 10^{-6}$ А, $b = 0,3$. Сопротивление R_2 при $l_1 = 10^{-5}$ см и $S_2 = 10^{-6}$ см 2 составляет порядка 1 Ом. Емкость $C = 1$ пФ ($C = \varepsilon\varepsilon_0 S/L$, где L — толщина ТГ $\sim 10^{-6}$ см).

Важная особенность планарного диода с ТГ — местоположение ТГ по отношению к катоду или аноду. Чем дальше от катода подключена ТГ, тем меньше область отрицательной активной составляющей импеданса. Это ограничивает частотные возможности планарного диода с ТГ по сравнению с “сэндвич”-вариантом диода.

Сопротивления R_1 и R_2 между А–К зависят от приложенной напряженности электрического поля и с увеличением напряженности растут. Это приводит при тех же емкостях и проводимостях к изменению частотных диапазонов отрицательной активной составляющей импеданса. Активная составляющая импеданса при перемещении ТГ к аноду от $l_2 \approx 0,05l_1$ до $l_2 \approx 0,5l_1$ уменьшается от 100 до 10 ГГц соответственно.

В случае зависимых от напряжения сопротивлений импедансные характеристики изменяются даже быстрее, чем при постоянных сопротивлениях. Так для $l_2 \approx 0,1l_1$ при не зависящих от напряжения сопротивлениях максимальная частота, на которой активная составляющая импеданса еще отрицательна, составляет около 100 ГГц, а для зависящих

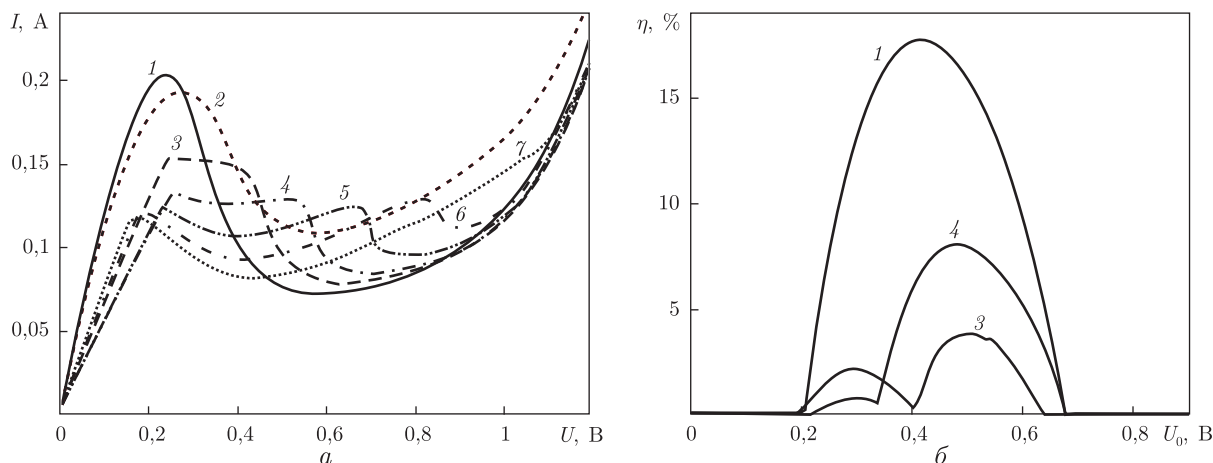


Рис. 2. ВАХ (а) и эффективность генерации (б) диода с двумя ТГ на частоте 10 ГГц при $R_3 = 0,5$ Ом: 1 — $R_1 = 9$ Ом, $R_2 = 0,5$ Ом; 2 — $R_1 = 8,5$ Ом, $R_2 = 1$ Ом; 3 — $R_1 = 7,5$ Ом, $R_2 = 2$ Ом; 4 — $R_1 = 6,5$ Ом, $R_2 = 3$ Ом; 5 — $R_1 = 5,5$ Ом, $R_2 = 4$ Ом; 6 — $R_1 = 4,5$ Ом, $R_2 = 5$ Ом; 7 — $R_1 = 3,5$ Ом, $R_2 = 6$ Ом

от напряжения сопротивлений — приблизительно 75 ГГц. Полученные результаты могут служить ориентиром при двухмерном рассмотрении работы планарного диода с ТГ.

Импедансные характеристики исследованных диодов дают возможность оценить их частотный диапазон. Более точные значения f_{\max} можно получить, определяя эффективность генерации планарных диодов с ТГ на основной частоте и гармониках в широком диапазоне частот, а также исследуя умножение частоты на гармониках.

Диод с двумя боковыми границами. Случай, когда боковая граница представлена двумя участками (участок 1 близок к аноду, участок 2 близок к катоду), представлен на рис. 1, а, в. При этом площадь каждой ТГ в два раза меньше площади исходной ТГ в предыдущем случае.

Из эквивалентной схемы (рис. 1, в) методом узловых напряжений находим ток всей структуры

$$I_0(U_0) = I_1(U_1) + I_{\text{ТГ}}(U_1) + I_c(U_1) + I_{\text{ТГ}}(U_2) + I_c(U_2). \quad (6)$$

Из эквивалентной схемы находились падения напряжения U_1 и U_2 на каждом узле

$$U_2 = U_0 - I_0 R_3, \quad (7)$$

$$U_1 = U_0 - I_0(R_2 + R_3) + I_{\text{ТГ}}(U_0 - I_0 R_3) R_2, \quad (8)$$

Сопротивления R_1 , R_2 и R_3 меняются от сотых до единиц Ом в зависимости от места подключений границы и зависят от приложенной напряженности электрического поля к ним. ВАХ в зависимости от положения границы 1 показаны на рис. 2.

Из анализа ВАХ диода следует, что смещение одной боковой границы к аноду при условии, что вторая граница остается возле катода, приводит:

- 1) к появлению на ВАХ диода двух участков ОДП, первый из которых обусловлен боковой границей вблизи катода 2, а второй — боковой границей вблизи анода 1;
- 2) к увеличению напряжения U_{\max} , соответствующего I_{\max} ;
- 3) к увеличению напряжения U_{\min} , соответствующего I_{\min} для обоих участков отрицательной дифференциальной проводимости;

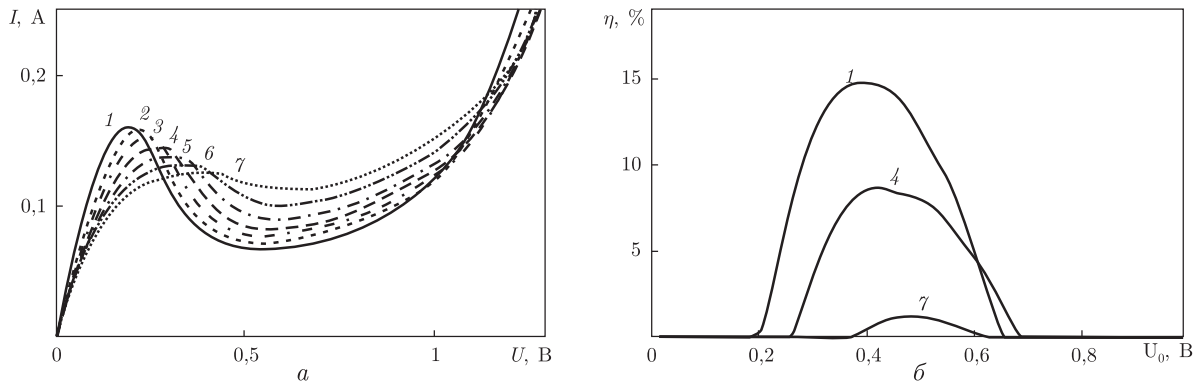


Рис. 3. ВАХ (а) и эффективность генерации (б) диода с пятью ТГ на частоте 10 ГГц при $R_3 = 0,5$ Ом: 1 — $R_1 = 9$ Ом; 2 — $R_1 = 8,5$ Ом; 3 — $R_1 = 7,5$ Ом; 4 — $R_1 = 6,5$ Ом; 5 — $R_1 = 5,5$ Ом; 6 — $R_1 = 4,5$ Ом; 7 — $R_1 = 3,5$ Ом

- 4) к уменьшению I_{\max} и увеличению I_{\min} для обоих участков отрицательной дифференциальной проводимости;
- 5) к изменению отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП);
- 6) при соответствующем расположении границ 1 и 2 диод может иметь два участка генерации по напряжению (см. рис. 2).

Диод со сплошной боковой ТГ. Случай, когда боковая граница непрерывна от точки 1 до точки 2. Границу условно разбиваем на N частей. Каждая часть границы может быть соединена с любой точкой на длине канала. При этом площадь каждой из частей в N раз меньше площади исходной границы. В данной работе рассматривается граница из пяти частей.

Ток через всю структуру определялся из эквивалентной схемы методом итерации [10, 11]. Подбиралось значение напряжения U_1 на сопротивлении R_1 . Далее рассчитывались ток $I_1(U_1)$ и ток через первую ТГ $I_{ТГ}(U_1)$. Поскольку ток через сопротивление R_2 равен сумме токов $I_1(U_1)$ и $I_{ТГ}(U_1)$, то напряжение U_2 равно:

$$U_2 = [I_1(U_1) + I_{ТГ}(U_1)]R_2. \quad (9)$$

Аналогичным образом определялись напряжения U_3, U_4, U_5 .

В общем виде схема расчета имеет вид:

$$I_N(U_N) = I_{N-1}(U_{N-1}) + I_{ТГ}(U_{N-1}), \quad (10)$$

$$U_N = [I_{N-1}(U_{N-1}) + I_{ТГ}(U_{N-1})]R_N. \quad (11)$$

При этом должно выполняться условие для напряжения, приложенного ко всей структуре:

$$U_0 = \sum_{k=1}^N U_k. \quad (12)$$

Все расчеты методом итерации проводились с точностью 10^{-4} .

На рис. 3 представлены ВАХ диода с пятью ТГ с разными вариантами подключения каждой границы. Увеличение протяженности границы от анода к катоду приводит к:

уменьшению I_{\max} и увеличению I_{\min} ;

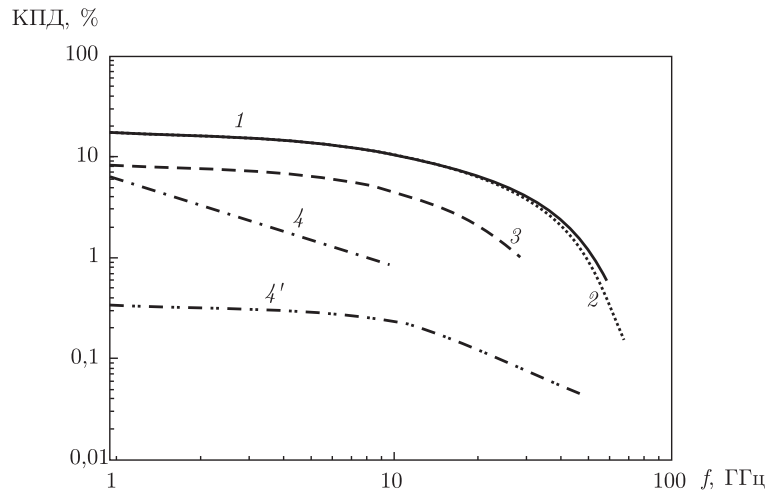


Рис. 4. Эффективность генерации диода с ТГ от частоты при условии: 1 — $N = 1$, $R_1 = 9,5$ Ом; 2 — $N = 2$, $R_1 = 9,5$ Ом; 3 — $N = 5$, $R_1 = 6,5$ Ом; 4 — $N = 2$, $R_1 = 6,5$ Ом (второй участок ОДП); 4' — $N = 2$, $R_1 = 6,5$ Ом (первый участок ОДП)

к увеличению напряжений U_{\max} и U_{\min} ;
уменьшению ОДП.

На рис. 3 показано, как такое изменение ОДП на ВАХ сказывается на максимальной эффективности генерации. Увеличение протяженности границы приводит к уменьшению максимального КПД с 17 (1 ГГц) до 0,16% (70 ГГц).

Емкость А–К намного меньше емкости ТГ ($l_1 \gg l_2$; l_1 — расстояние между А–К, l_2 — расстояние между ТГ и катодом). С увеличением частоты существенную роль будет играть емкостное сопротивление $Z_C = 1/\omega C$, которое включено параллельно активной проводимости ТГ и которое будет определять частотный диапазон работы диода с ТГ.

Частотные зависимости. С увеличением частоты область ОДП уменьшается и уменьшается эффективность генерации во всех рассматриваемых случаях. Если граница находится возле катода, то КПД уменьшается с 17 % при рабочей частоте 1 ГГц до 0,16 % при частоте 70 ГГц (рис. 4).

Во втором случае, когда граница разбита на две составные части и одна подключена близко к катоду, а вторая находится на некотором расстоянии от анода, появляется два участка ОДП. В этом случае с увеличением частоты сначала исчезает участок ОДП, обусловленный ТГ возле анода (КПД уменьшается с 6% на 1 ГГц до 0,84% на 10 ГГц). Первый же участок ОДП уменьшается медленнее и КПД уменьшается с 0,33% при рабочей частоте 1 ГГц до 0,04% при частоте 60 ГГц (рис. 4).

В случае непрерывной ТГ при расширении ее к аноду также изменяется КПД от 8% на частоте 1 ГГц до 0,04% на частоте 60 ГГц (см. рис. 4). Если изменить параметры рассматриваемого диода, например, уменьшить площадь А–К и площадь ТГ на порядок, то для последнего случая частотный диапазон может расширяться до сотен ГГц.

Таким образом, результаты проведенных расчетов показали следующее.

1. Планарный диод с одной ТГ может эффективно генерировать в диапазоне частот до 60–70 ГГц при приведенных в работе параметрах областей и ТГ.

2. Диод с двумя боковыми границами (одна перемещающаяся к аноду, вторая у катода) может иметь два участка ОДП и две зоны генерации по напряжению.

Перемещение первой границы к аноду изменяет ВАХ диода и КПД. Такой диод может эффективно работать на частотах до 60–70 ГГц. Наибольший вклад частотный диапазон работы вносит ТГ, расположенная вблизи катода.

3. Расширение сплошной боковой ТГ к аноду при ее электрическом соединении с анодом изменяет ВАХ диода и изменяет КПД от 8% до 0,05% в диапазоне частот от 1 ГГц до 60 ГГц.

4. Уменьшение параметров планарного диода, в частности площадей, на порядок может увеличить частотный диапазон работы планарного диода с ТГ до сотен ГГц.

1. Прохоров Э. Д., Боцула О. В. Отрицательная дифференциальная проводимость полупроводникового диода с туннельными боковыми гранями // Радиофизика и электроника. – 2010. – **15**, № 2. – С. 109–113.
2. Прохоров Э. Д., Боцула О. В., Клименко О. А. Влияние междолинного переноса электронов на эффективность генерации диодов с туннельными границами на основе GaAs // Доп. НАН України. – 2012. – № 4. – С. 75–80.
3. Прохоров Э. Д., Боцула О. В., Клименко О. А. Генерация и умножение частоты диодами с туннельными границами на основе GaAs // Радиофизика и электроника. – 2011. – **16**, № 3. – С. 91–96.
4. Прохоров Э. Д., Боцула О. В., Клименко О. А. Эффективность генерации диодов с резонансно-туннельными границами в сэндвич варианте // Там же. – 2012. – **17**, № 3. – С. 72–78.
5. Esaki L. New phenomenon in narrow Germanium *p-n* junction // Phys. Rev. – 1958. – **109**. – P. 603–605.
6. Hall R. N. Tunnel diodes // IRE Trans. Electron Devices. – 1960. – **7**, No 1. – P. 1–9.
7. Зи С. Физика полупроводниковых приборов: в 2 т. Т. 2. – Москва: Мир, 1984. – 456 с.
8. Прохоров Э. Д. Твердотельная электроника. – Харьков: Изд-во Харьк. нац. ун-та им. В. Н. Каразина, 2008. – 544 с.
9. Иващенко В. М., Митин В. В. Моделирование кинетических явлений в полупроводниках. Метод Монте-Карло. – Киев: Наук. думка, 1990.
10. Нейман Л. Р., Демирчан К. С. Теоретические основы электротехники. – Ленинград: Энергоиздат, 1981. – 536 с.
11. Касаткин А. С., Немцов М. В. Электротехника: учебн. для вузов. – Москва: Высш. шк., 2003. – 542 с.

Харьковский национальный университет
им. В. Н. Каразина

Поступило в редакцию 10.09.2013

Е. Д. Прохоров, О. В. Боцула, О. О. Реутіна

Эффективність генерації планарних діодів $n^+ - n - n^+$ з тунельними межами

*Розглядаються діоди $n^+ - n - n^+$ з тунельними або резонансно-тунельними бічними межами. Однією бічною межею такого діода є напівізолююча підкладка GaAs, на якій вирощений *n*-шар. На протилежній бічній межі може розташовуватися тунельна або резонансно-тунельна межа кінцевої протяжності. Досліджуються вольт-амперні та енергетичні характеристики таких діодів у широкому діапазоні частот мм-діапазону. Показано, що діоди $n^+ - n - n^+$ з тунельними або резонансно-тунельними бічними межами мають негативну диференціальну провідність у широкому діапазоні частот мм-діапазону і можуть бути використані для генерації та посилення. Показано також, як впливає місце розташування і протяжність бічних меж на енергетичні та частотні характеристики діода.*

E. D. Prokhorov, O. V. Botsula, O. A. Reutina

Efficient generation of planar diodes $n^+ - n - n^+$ with tunnel boundaries

Diodes $n^+ - n - n^+$ with tunnel or resonant-tunneling lateral boundaries are considered. One side of the boundary of such a diode is a semiinsulating substrate of GaAs, which is grown on the n -layer. Tunneling or resonant-tunneling boundary of finite extent can be located on the opposite side of the boundary. The current-voltage curve and the power characteristics of such diodes are investigated in the mm wide frequency range. It is shown that diodes $n^+ - n - n^+$ with tunnel or resonant tunneling lateral boundaries have a negative differential conductance over a wide frequency band and can be used for the generation and the amplification. The effects of the location and the extent of the lateral boundaries on the energy and frequency characteristics of a diode are studied.



УДК 544

В. Д. Курочкін

Математичне моделювання процесу утворення шаруватих конденсатів при електронно-променевому випаровуванні–конденсації бінарних систем типу Cu–Cr

(Представлено академіком НАН України Ю. В. Найдічем)

Розглядається механізм спонтанного утворення шаруватих конденсатів при електронно-променевому випаровуванні з окремих тиглів та подальшої конденсації бінарних металевих систем. Моделювання кінетичним методом Монте-Карло росту кристалітів показує, що конкурентний механізм призводить до нелінійної залежності швидкості росту кристалітів кожної фази від густини потоків. Розрахунок масопереносу свідчить, що внаслідок відбиття від поверхні конденсату частини потоку атомів на поверхні ванн може утворюватися екрануюча плівка з більш тугоплавкого компонента, завдяки якій створюється зворотний зв'язок між швидкістю випаровування компонентів та складом конденсату. Показано, що при певних умовах це призводить до виникнення автоколивань, аперіодичного або стохастичного режимів конденсації. Разом з флуктуаціями температури ванн це може призводити до появи шаруватих структур із складною ієрархією товщини шарів, які спостерігаються в реальних конденсатах.

Електронно-променева технологія широко використовується як для нанесення покриттів, так і для одержання компактних матеріалів різного призначення [1–4]. Отримані таким методом композиційні матеріали Cu–Cr, Cu–Mo, Cu–W використовують для виготовлення електричних контактів [5]. Порівняно з методами порошкової металургії електронно-променева технологія забезпечує низький вміст газів у матеріалі, що є суттєвим для роботи електричних контактів. Вважалося, що спільне випаровування компонентів з двох ванн розплавів повинно призводити до утворення гомогенного матеріалу заданого складу. В дійсності, бінарні системи з міддю та другим компонентом, швидкість випаровування якого значно менша (Cu–Cr, Cu–Mo, Cu–W, Cu–Ni), утворюють шаруваті конденсати з великою різницею концентрацій компонентів у шарах і складною ієрархією товщини шарів, з квазіперіодичною структурою, незважаючи на стабільність параметрів обладнання [5]. Згідно з умовами експлуатації Cu–Cr контактів, відносна частка хрому у загальному потоці за

© В. Д. Курочкін, 2014

допомогою температури та діаметра ванн підтримується близько 30%. Характерною рисою цих конденсатів є наявність шарів з більш-менш рівномірною концентрацією, товщиною до декількох сотень мікрометрів при наявності прошарків завтовшки десятки нанометрів. Концентрація компонентів у шарах коливається від 95% Cu і 5% Cr до 20–30% Cu і відповідною кількістю хрому. Розподіл концентрації основних і домішкових атомів був виміряний за допомогою мас-спектрометра з жевріючим розрядом VG9000 [6]. Ці результати будуть використані в даній роботі для порівняння з розрахованою концентрацією компонентів у шарах.

Незважаючи на те що цей феномен давно відомий, кількісних розрахунків, які б пояснювали механізм його утворення, на даний момент не існує. Відомі гіпотези пояснюють утворення таких структур розпадом пересичених Cu–Cr розчинів на поверхні конденсату [7]. Згідно із фазовою діаграмою, система Cu–Cr має евтектику при температурі 1077 °C і приблизно 1,5% (ат.) хрому. Тому, якщо припустити можливість утворення у паровій фазі крапель “пересичених розчинів” (згідно з фазовою діаграмою, ці компоненти у рідкій фазі утворюють безперервні розчини), то їх розпад повинен призводити до типових евтектичних анізотропних структур. Пояснити появу виділених напрямків, паралельних підкладці макроскопічної товщини з вмістом хрому близько 3–5%, в той час як із співвідношення потоків очікується концентрація порядку 30–40%, згадані гіпотези не в змозі. Для системи Cu–Ni, яка має безперервні розчини в рідкій та твердій фазі, така гіпотеза тим більше неприйнятна, хоча конденсат з цих компонентів також має шарувату структуру [7]. Існує також припущення, згідно з яким поверхневий шар під час конденсації знаходиться у рідкому стані, що гіпотетично може призводити до виникнення шаруватості. Однак температура підкладки контролюється і підтримується на рівні 0,3–0,5 від температури плавлення, що підтверджується також чітко вираженою стовпчастою структурою кристалітів, осі яких направлені вздовж потоку конденсації. Крім того, такі аргументи також не дають відповіді на причини появи складної ієрархії товщини шарів.

Тому в даній роботі пропонується альтернативний підхід до пояснення цього явища, який ґрунтується на математичному моделюванні росту кристалітів бінарних систем та розрахунках процесів масопереносу. Логічно припустити, що основною причиною появи шаруватості є варіації потоків конденсації і особливості росту кристалітів. Механізм росту кристалітів був розглянутий раніше за допомогою математичної моделі з використанням кінетичного методу Монте-Карло [8, 9]. З’ясовано зв’язок між потоками конденсації, концентрацією центрів кристалізації та складом конденсату. Експериментально і теоретично було показано, що шари складаються із стовпчастих кристалітів, направлених вздовж потоку конденсації (рис. 1). Такий характер росту відповідає встановленій раніше закономірності, згідно з якою в діапазоні відношення температур підкладки до температури плавлення металу 0,3–0,5 утворюються стовпчасти кристаліти [3].

Адекватність моделі була підтверджена як близькістю змодельованих та реальних структур конденсатів, так і хорошою узгодженістю розрахованих і експериментальних даних щодо питомої електропровідності шарів [9].

Конкурентний механізм росту кристалітів, які утворюються на основі кожного компонента, призводить до s-подібної нелінійної залежності складу конденсату від швидкості випаровування компонентів (рис. 2). На відріжку від нуля до 50% по осі абсцис крива досить близька до експоненціального зростання. При відносній частці потоку одного з компонентів порядку 30% утворюється конденсат, який містить менше 5% цього компонента. Ця величина залежить також від чистоти компонентів і зменшується із зменшенням концентрації центрів кристалізації, тобто з підвищенням чистоти матеріалів (див. рис. 2).

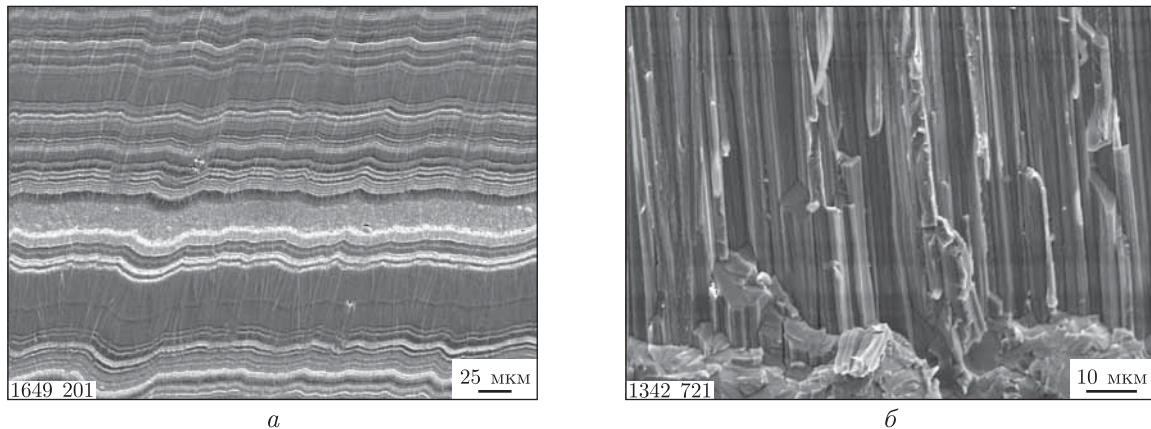


Рис. 1. Структура перерізу конденсата після травлення в жевріючому розряді (а) та характер поверхні після випробувань зразка на розрив (б). Темні шари збагачені міддю, світлі — хромом

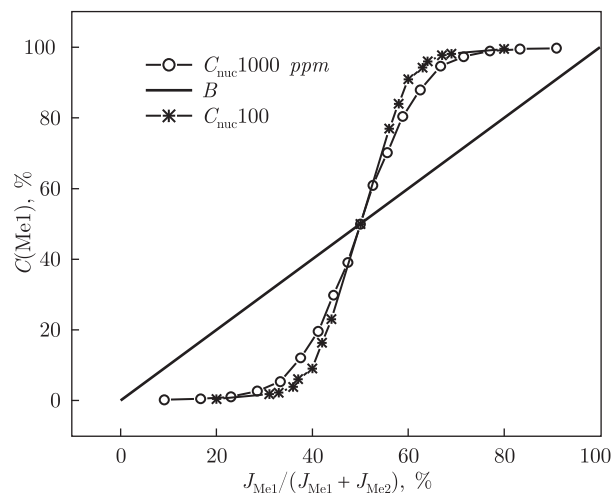


Рис. 2. Залежність концентрації компонента Me1 від його відносної частки у загальному потоці. Прямка відповідає концентрації, яка очікується із співвідношення потоків. Концентрації центрів кристалізації на хромі і міді — 0,1 та 0,01%

Решта потоку такого компонента відбивається від поверхні конденсату і частково осідає у ваннах розплавів. Ефект відбиття відомий у техніці електронно-променевого випаровування і використовується для формування плівок на поверхні розплавів за допомогою спеціальних “дзеркал”. Відомо, що при конденсації активна десорбція атомів з поверхні субстрату відбувається при відносній температурі поверхні $T/T_m = 0,75-0,8$ (T_m — температура плавлення) [3]. При бомбардуванні поверхні атомами виділяється поряд з кінетичною енергією також енергія конденсації. Для міді вона становить ~ 3 eV на атом (300 кДж/моль), для хрому — 3,6–3,3 eV), що більше, ніж на порядок перевищує кінетичну енергію атомів при температурі ванни розплаву. Таке бомбардування атомами одного компонента активізує десорбцію атомів іншого компонента, які слабо зв’язані з поверхнею. Повернення частки потоку більш тугоплавкого компонента (Cr, Mo, W, Ni) у ванну розплаву міді призводить до часткового запылення її поверхні і зменшення потоку її випаровування. В роботі [9] припускається, що разом з флуктуаціями температур тиглів екрануючі плівки можуть бути

причиною виникнення автоколивань потоків і утворення шаруватих структур. Невелике зменшення потоку міді внаслідок конкурентного механізму росту призводить до сильної зміни складу конденсату (рис. 2), тобто до зменшення в ньому концентрації міді і відповідно збільшення концентрації хрому, що, в свою чергу, зменшує відбиття потоку хрому від поверхні конденсату і призводить до часткового очищення поверхні мідної ванни. Тепер вже надлишок парів міді відбивається від конденсату, збагаченого хромом, і осідає на поверхні тигля з розплавом хрому, частково екрануючи його випаровування. Таким чином, встановлюється негативний зворотний зв'язок між швидкістю випаровування компонентів і складом конденсату. Відомо, що присутність у системі нелінійного елемента та наявність зворотного зв'язку може призводити до різного типу процесів: аперіодичного, коливального або стохастичного.

Чисельний розрахунок масопереносу разом з моделлю Монте-Карло [8, 9] дає можливість розраховувати структуру та склад шарів при заданих густинах потоків компонентів, що конденсуються. Становить інтерес також вивчення впливу параметрів процесу (температури ванн розплавів, тілесних кутів для підкладки та ванн тощо) на залежність концентрації компонентів в конденсаті від його товщини. Для створення розширеної моделі в даній роботі розраховано потоки атомів, які відбиваються від конденсату, а також баланс потоків, які утворюють плівку іншого металу на поверхні ванн та призводять до її випаровування.

Потік атомів, що відбивається від поверхні конденсату, розподіляється рівномірно у напівсферу. Для визначення його частки, яка потрапляє у ванни розплавів, необхідно враховувати тілесний кут, під яким видно ванни з точок на поверхні конденсату. В роботі використовували відношення тілесних кутів $\varphi = \varphi_1/\varphi_2$, де φ_1 — кут, під яким видна ванна розплаву з точок на поверхні конденсату; φ_2 — кут, під яким видно поверхню конденсату з центра тигля. Потік атомів, що відбивається від конденсату і спрямований у ванну розплаву іншого компонента, визначається таким виразом:

$$J_{\text{Me1_to_Me2}}(t) = J_{\text{Me1}}(t)\phi\left(1 - \frac{C_{\text{Me1}}(t)}{C_{\text{rel_Me1}}(t)}\right) + k_b J_{\text{Me1}}(t), \quad (1)$$

де $J_{\text{Me1}}(t)$ — проекція потоку атомів металу Me_1 на нормаль до поверхні конденсату; $C_{\text{rel_Me1}}(t) = J_{\text{Me1}}(t)/J_{\text{total}}(t)$ — концентрація компонента в конденсаті, яка очікується із співвідношення потоків ($J_{\text{total}}(t)$ — сумарний потік); $C_{\text{Me1}}(t)$ — концентрація компонента Me_1 , яка розрахована за допомогою моделі Монте-Карло; $k_b J_{\text{Me1}}(t)$ — розсіяний від обладнання фон ($k_b \approx 0,01-0,03$). З виразу (1) видно, що в ті моменти часу, коли вміст компонента на поверхні конденсату дорівнює розрахованому із співвідношення потоків, відбитий потік зникає (за виключенням невеликого розсіяного фону). Із зростанням параметра φ збільшується частина відбитого потоку, яка потрапляє у ванну розплаву, що певною мірою характеризує величину зворотного зв'язку у даній автоколивальній системі. Величина параметра приймалася близькою до значень, які існують у реальних установках.

Ймовірність P попадання атома в площу S_A , яка у середньому припадає на один атом, при заданій густині потоку атомів J за інтервал часу Δt описується експоненціальним розподілом, з якого безпосередньо випливає, що час, необхідний для покриття поверхні суцільною плівкою, може бути визначений лише з певною ймовірністю:

$$\Delta t_1 = -\ln(1 - P)/(S_A J). \quad (2)$$

Ця формула відображає той очевидний факт, що при конденсації атоми розподіляються нерівномірно і утворюють плівку різної товщини. Розрахунки ведуться з кроком $\Delta t_2 \ll \Delta t_1$.

За час Δt_2 , враховуючи на порядок більший первинний потік атомів, що конденсуються, ніж відбитий потік, встигає утворитися суцільний шар конденсату завтовшки декілька десятків нанометрів. Його склад знаходиться з моделі Монте-Карло і описується залежністю, зображеною на рис. 2. Певну складність становить оцінка ефективної товщини плівки на поверхні ванн, яка може істотно вплинути на швидкість випаровування основного металу. При швидкостях випаровування, які використовують у технологічному процесі, за час утворення суцільної плівки на поверхні конденсату завтовшки декілька десятків атомних шарів на поверхні ванн відбитий потік утворює плівку завтовшки декілька атомних шарів (3–5). В моделі припускалося, що плівка тугоплавкого металу ефективною товщиною N_{eff} практично повністю затримує випаровування, а ослаблення швидкості випаровування основного металу ванни пропорційне товщині плівки та залежить від її суцільності. Внаслідок ймовірного характеру процесу плівка може мати вигляд острівців, які не повністю вкривають поверхню. Для з'ясування впливу параметра N_{eff} на характер процесу розрахунки проводилися для різних значень товщини ($N_{\text{eff}} = 5\text{--}100$ атомних шарів). Для кожної ванни розраховується товщина шару на поверхні ванни в нормованому на N_{eff} вигляді, яка вкривається плівкою за інтервал часу Δt_2 , та сумарна частина поверхні, яка вкрита плівкою з початку процесу. Вони визначаються з таких виразів:

$$S(\Delta t) = \frac{\Delta t_2 S_A^{**} (J_{\text{Me1_to_Me2}} - J_{\text{Me1_from_Me2}})}{N_{\text{eff}}}, \quad (3)$$

$$S(t) = S(t) + S(\Delta t), \quad (4)$$

де $J_{\text{Me1_to_Me2}}$ та $J_{\text{Me1_from_Me2}}$ — відповідно потоки більш тугоплавкого компонента на поверхню ванни та його потік, що випаровується за інтервал часу Δt_2 . Оскільки температури ванн відомі, розраховуються швидкості випаровування плівки іншого металу з поверхні ванн. При цьому враховували, що тонкі плівки можуть частково розчинятися у ванні основного металу і швидкість їх випаровування залежить від ступеня покриття ванни:

$$J_{\text{Me1_from_Me2}}(t) = J_{\text{Me1}} S(t). \quad (5)$$

Швидкості випаровування основного металу ванн, які частково вкриті плівкою іншого металу, визначалися відповідно з виразу

$$J_{\text{Me2}}(t) = J_{\text{Me2}}(1 - S(t)). \quad (6)$$

Тут J_{Me1} та J_{Me2} — швидкості випаровування металів з чистої поверхні ванн. Швидкості випаровування металів при заданих температурах знаходяться з відомих величин тиску пари за допомогою формули Кнудсена. Можна також застосовувати для цього теорію абсолютних швидкостей реакцій, яка дає досить точні значення, як було показано в роботі [10]. Використання значень швидкості випаровування для чистих металів плівок з поверхні ванн є певним спрощенням у моделі, що впливає на швидкість випаровування металу плівки, та числові значення амплітуди коливань, середні концентрації тощо, механізм процесу при цьому не змінюється.

Чисельне розв'язання задачі починається в припущенні чистої поверхні ванн розплавів при початкових значення потоків $J_{\text{Me1}}(t_0)$, $J_{\text{Me2}}(t_0)$, яке визначається лише металом, температурою поверхні ванн та їх діаметрами. На кожному кроці з моделі Монте-Карло знаходили склад поверхні, з якого за формулою (1) розраховували відбиті потоки, частину

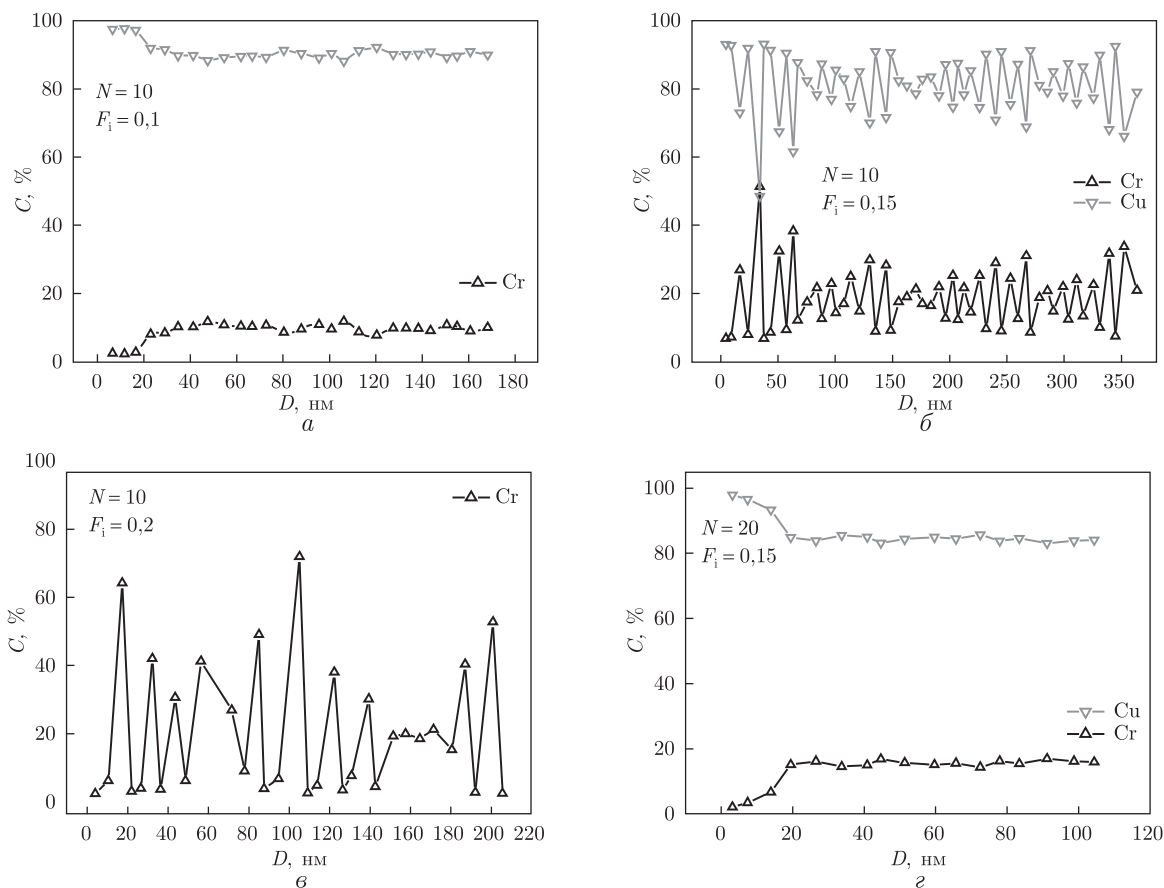


Рис. 3. Розподіл концентрації Cr(Cu) по глибині конденсату залежно від параметрів системи: $T(\text{Cu}) = 1700 \text{ K}$, $T(\text{Cr}) = 1770 \text{ K}$, $J_{\text{Cr}}(t_0)/J_{\text{total}}(t_0) = 0,33$, $k_b = 0,01$; $N = 10$, $\varphi = 0,1, 0,15, 0,2$, (а, б, в — відповідно); $N = 20$, $\varphi = 0,15$ (г)

поверхні розплавів, яка вкрита плівкою іншого металу за формулами (3), (4), потім обчислювали нові швидкості випаровування за формулою (6), які використовували в моделі Монте-Карло для знаходження складу конденсату. Виходячи з цього значення, розраховували за формулою (1) відбиті потоки, які спрямовані у ванни інших металів, нові значення частин ванн, вкритих екрануючими плівками і т. д. в циклі.

З розрахунків видно, що в даній системі дійсно виникають автоколивання (рис. 3). Із зростанням параметра φ збільшується амплітуда коливань, а також середнє значення концентрації. Оскільки розглядається бінарна система, другий компонент на деяких рис. 3 не показаний. Розрахунки проведено для випадку, коли концентрація центрів кристалізації на поверхні хрому для атомів міді така ж, як для атомів хрому на поверхні міді, і дорівнює 0,01% (ат.).

Важливо відзначити, що в автоколивальному режимі середня концентрація хрому значно більша, ніж за відсутності екрануючої плівки на поверхні міді, при тих же значеннях температур поверхні тиглів. Максимальна концентрація хрому в автоколивальному режимі в шарах становить 60–80%, що добре збігається з результатами, одержаними мас-спектрометричним методом [6]. При збільшенні ефективної товщини екрануючої плівки зменшується амплітуда коливань, а при подальшому зростанні процес стає аперіодичним (рис. 3, г).

Автоколивання є не єдиною причиною виникнення шаруватості конденсату. На перебіг процесу може також істотно впливати флуктуація температури ванн. Аперіодичний режим пояснює існування шарів конденсату з постійною концентрацією макроскопічної товщі. Для виведення процесу з цього стану достатньо невеликих флуктуацій температури поверхні ванни, що призводять до значної зміни густини потоків випаровування. Так для хрому і міді в даному температурному діапазоні зміни температури на 50 К призводять до зміни швидкості випаровування більше, ніж в два рази. Враховуючи, що такі коливання можливі для кожного компонента в різні боки, то подібних коливань, як впливає з рис. 2, більше, ніж достатньо, для утворення шарів із різною концентрацією компонентів. Додатковий внесок у нестабільність процесу дає нерівномірне осадження атомів в різних ділянках підкладки, яке залежить від проекції на нормаль потоку атомів, флуктуації концентрації центрів кристалізації, що залежить від однорідності зливків, ефективності вакуумної системи тощо.

У даній роботі ми не ставили за мету одержати точні числові значення концентрації компонентів у шарах та їх товщі. Задачею розрахунків було показати, що запропонований механізм може призводити до виникнення автоколивань. Дійсно, вони виникають в системі у широкому діапазоні змін швидкостей випаровування, прийнятих величин ефективної товщини екрануючої плівки, співвідношення діаметрів підкладки і ванн (параметра φ), концентрації центрів кристалізації. Ці параметри істотно впливають на характер коливань, їх частоту, амплітуду. Необхідною умовою виникнення автоколивань є значна різниця у швидкості випаровування компонентів та нелінійна залежність швидкості росту кристалітів від густини потоків компонентів, що є наслідком конкурентного росту кристалітів різних металів. Розрахунки показують, що в системі можливе встановлення аперіодичного режиму з досить стабільними концентраціями компонентів, які визначаються не лише початковими швидкостями випаровування, але всім комплексом процесів переносу та екранування плівкою тугоплавкого металу поверхні ванни більш легкого компонента. Запропонована математична модель пояснює утворення шарів складної ієрархії як із шарами мікронної, так і нанометричної товщини. Важливим аргументом на користь запропонованого підходу є узгодження між розрахованою максимальною концентрацією компонентів в шарах та експериментальними даними, одержаними мас-спектрометричним методом.

1. Мовчан Б. А., Малащенко И. С. Жаростойкие покрытия, осаждаемые в вакууме. – Киев: Наук. думка, 1983. – 230 с.
2. Movchan B. A., Yakovchuk K. Yu. Functionally graded EB-PVD coatings // Surface and Coat. Technology. – 2002. – **149**. – P. 252–262.
3. Movchan B. A. Inorganic materials and coatings produced by EBPVD // Surf. Eng. – 2006. – **22**. – P. 35–46.
4. Singh J., Wolfe D. E. Nanostructured component fabrication by electron beam-physical vapour deposition // J. of Mater. Engineering and Performance. – 2005. – **14**. – P. 448–459.
5. Хоменко Е. В., Минакова Р. В., Осокин В. А., Гречанюк Н. И. Структура и свойства медно-хромовых конденсатов и перспективы их использования в качестве вакуумных контактов // Электрич. контакты и электроды. – 2001. – С. 12–22.
6. Курочкин В. Д. Использование метода послыйного анализа вакуумных Cu–Cr конденсатов на масс-спектрометре с тлеющим разрядом // Порошк. металлургия. – 2006. – **7/8**. – С. 106–115.
7. Гречанюк Н. И., Минакова Р. В., Головкина М. Е. и др. Формирование методом электронно-лучевого испарения-конденсации Cu–Fe и Cu–Ni композиционных материалов и их свойства // Электрич. контакты и электроды. – 2012. – С. 150–160.
8. Курочкин В. Д., Кравченко Л. П., Минакова Р. В., Гречанюк М. И. Структура конденсированного композиционного материала Cu–Cr. Моделирование. Эксперимент // Там же. – 2004. – С. 4–19.
9. Курочкин В. Д. Механізм формування структури та розрахунки питомого електричного опору шарів Cu–Cr конденсатів // Доп. НАН України. – 2004. – **12**. – С. 93–100.

10. Курочкин В. Д. Частотный коэффициент в теории абсолютных скоростей реакций // Там само. – 2012. – 10. – С. 130–135.

Институт проблем материаловедения
им. И. М. Францевича НАН Украины, Київ

Надійшло до редакції 13.11.2013

В. Д. Курочкин

Математическое моделирование процесса образования слоистых конденсатов при электронно-лучевом испарении–конденсации бинарных систем типа Cu–Cr

Рассматривается механизм спонтанного образования слоистых конденсатов при электронно-лучевом испарении из отдельных тиглей и последующей конденсации бинарных металлических систем. Моделирование кинетическим методом Монте-Карло роста кристаллитов показывает, что конкурентный механизм приводит к нелинейной зависимости скорости роста кристаллитов каждой фазы от плотности потоков. Расчет массопереноса свидетельствует, что в результате отражения от поверхности конденсата части потока атомов на поверхности ванн может образовываться экранирующая пленка из более тугоплавкого компонента, благодаря которой создается обратная связь между скоростью испарения компонентов и составом конденсата. Показано, что при определенных условиях это приводит к возникновению автоколебаний, аperiodического или стохастического режимов конденсации. Вместе с флуктуациями температуры ванн это может приводить к появлению слоистых структур со сложной иерархией толщин слоев, которые наблюдаются в реальных конденсатах.

V. D. Kurochkin

Simulation of the process of formation of layered condensates at EB-PVD of binary systems of Cu–Cr type

The mechanism of spontaneous formation of layered condensates at the electron-beam physical vapor deposition from separate crucibles of binary metallic systems is discussed. Simulation of crystallite growth by the kinetic Monte Carlo method shows that the competitive mechanism leads to a nonlinear dependence of the crystallite growth rate in each phase on the density phase flows. The calculation of the mass transfer indicates that, as a result of the reflection from the condensate surface, atoms of the refractory component may form a shielding film of the more refractory component on the surface of a melt pool. This results in the formation of a feedback between the evaporation rate and the composition of the condensate. It is shown that, under certain conditions, this leads to the onset of self-oscillations of evaporation rates and establishing the oscillatory, aperiodic, or stochastic condensation modes. With fluctuations of the temperature of pools, this effect can lead to the formation of layered structures with complex hierarchies of the thicknesses of layers that are observed in real condensates.



УДК 549.621.98(477)

О. А. Вишневський

Про першу знахідку зонального піропу в осадовому чохлі Українського щита

(Представлено членом-кореспондентом НАН України Р. Я. Белевцевим)

Схарактеризовано першу знахідку зонального піропу в теригенних відкладах України. Зерно розміром $\sim 0,3 \times 0,4$ мм є фрагментом крупнішого індивіда та хімічно негомогенне. Від краю до краю в ньому закономірно збільшується вміст FeO (від 8,6 до 11,6%) і відповідно зменшується вміст MgO (від 20,6 до 17,8%). При цьому концентрація інших індикаторних елементів (Ti, Ca, Cr) залишається незмінною. За результатами аналізу отриманих даних було зроблено висновок, що його корінними джерелами могли бути кімберліти або гранатові перидотити ультраметаморфічних комплексів. Тиск і температура кристалізації піропу становили близько 2,0 ГПа та 800–850 °С. Що стосується встановленої в ньому зональності, то остання, найімовірніше, є результатом його посткристалізаційного субсолідусного перетворення в материнських породах при порівняно високих температурах і тиску.

Піроп є одним з найвивченіших акцесорних мінералів, поширених у різновікових осадових породах України. Вважалося [1 та ін.], що його материнськими породами могли бути виключно кімберліти, з якими в різних регіонах світу пов'язані родовища алмазів. В Україні було відкрито піропвмісні не алмазоносні породи, визначені як кімберліти, зокрема в Приазов'ї. Незважаючи на тривалі пошуки, в інших регіонах (на Волині, в Побужжі, Придністров'ї) корінні джерела детритових піропів й дотепер не виявлено [1]. А отже, питання про їх походження в межах цих територій залишається відкритим. Відзначимо, що останнім часом з'явилися достатньо обґрунтовані припущення про їх можливий некімберлітовий генезис [2, 3].

На сьогодні піропи з вторинних колекторів України вивчено достатньо детально, тому, користуючись традиційними методами дослідження, виявити в них щось нове майже неможливо. Втім, як з'ясувалось, це не так і свідченням тому є знахідка магнезійального гранату з досить незвичним хімічним складом.

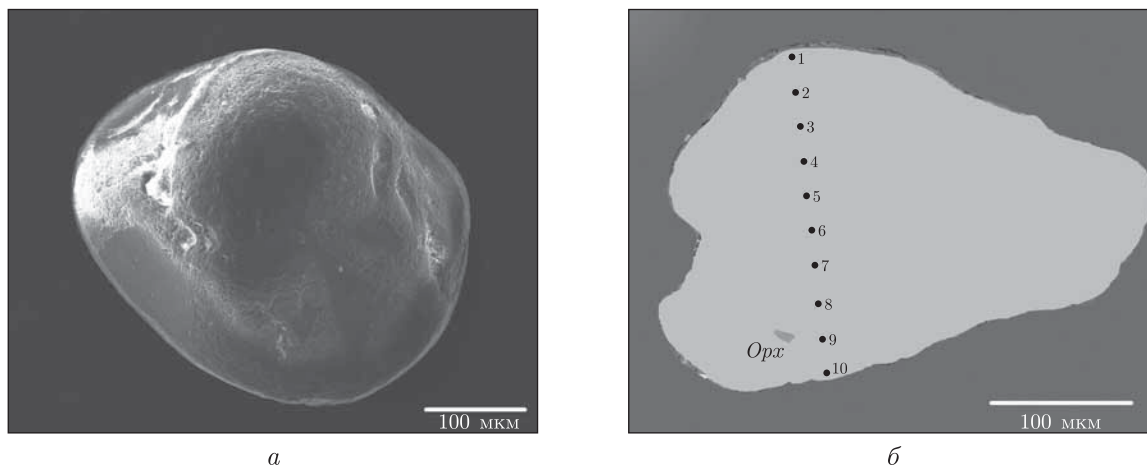


Рис. 1. Зональний піроп із руслового алювію середньої течії р. Уборть (РЕМ-знімки): *a* — загальний вигляд; *б* — полірований зріз (точки аналізу 1–10 на мікрофотографії відповідають номерам аналізів у табл. 1; *Opx* — включення ортопіроксену)

Об'єктом нашого дослідження були піропи з руслового алювію середньої течії р. Уборть. Здебільшого це середньозношені зерна розміром 0,3–0,5 мм, кутастої, рідше округлої, форми з шорсткими й притертими ребрами та дрібногорбкуватою або тонкоматованою, а на сколках — гладкою блискучою поверхнею. Переважна їх більшість належить до категорії низько- й середньохромових помірно кальцієвих (Cr_2O_3 1,6–5,5%, CaO 4,2–4,9%, f 0,16–0,19) та, найімовірніше, відноситься до лерцолітового парагенезису. Отже, у вивченій пробі маємо піропи, що є типовими для різновікових теригенних відкладів, поширених на території правобережної України.

У периферійній частині одного із зразків (ВП-61) під мікросондом було виявлено мікровключення ортопіроксену (рис. 1; табл. 1). Подальше ретельне дослідження відкрило ще одну, вельми неочікувану його особливість. Склад піропу, що виміряний у кількох точках, виявився дещо відмінним, зокрема за вмістом заліза та магнію. Зважаючи на це, додатково було виконано серію аналізів по профілю через зерно (див. рис. 1). Згідно з отриманими нами результатами, склад мінералу змінюється цілком закономірно, а отже, він є хімічно зональним (див. табл. 1). У напрямі від одного краю зерна до іншого в ньому поступово зменшується вміст магнію і навпаки збільшується вміст заліза, а під кінець ще й марганцю. Відповідно змінюються показник залізистості та вміст піропового й альмандинового компонентів. При цьому концентрація інших індикаторних елементів — Ti , Ca , Cr і відповідно андрадитового, grosularового та уваровітового мінералів залишається практично незмінною.

Зауважимо, що раніше зональні піропи в теригенних відкладах України не відзначались. Принаймні в літературних джерелах будь-які згадки, а тим більше дані про них відсутні. Тому треба визнати, що це перша така знахідка, яка безперечно заслуговує на увагу.

На даний час зональні піропи були виявлені в кімберлітах, мантійних ксенолітах із них [4–6] та масивах гранатових перидотитів [7–10]. Як свідчить порівняльний аналіз, при певній схожості вони все ж таки дещо відрізняються між собою. Особливістю перших є різноманітність схем зональності, що проявляється за вмістом Cr , Ti , Ca , Mg , Fe , Al (за кількома або всіма елементами одночасно) і в більшості випадків має складний, часом нерегу-

Таблиця 1. Мікроезондові аналізи зонального піропу (№1–10) та включення в ньому ортопіроксену (№ 11) (зразок ВП-61)

| Компонент | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11* |
|--------------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Масова частка, % | | | | | | | | | | | |
| SiO ₂ | 41,62 | 41,95 | 41,84 | 41,89 | 42,02 | 41,42 | 41,37 | 41,33 | 41,65 | 41,56 | 52,37 |
| TiO ₂ | 0,45 | 0,45 | 0,45 | 0,41 | 0,44 | 0,45 | 0,49 | 0,48 | 0,43 | 0,48 | 0,20 |
| Al ₂ O ₃ | 22,55 | 21,88 | 22,21 | 21,84 | 21,97 | 22,43 | 21,77 | 22,24 | 21,94 | 21,69 | 7,47 |
| Cr ₂ O ₃ | 1,62 | 1,54 | 1,60 | 1,69 | 1,59 | 1,57 | 1,72 | 1,71 | 1,65 | 1,60 | 0,42 |
| FeO | 8,58 | 9,04 | 9,02 | 9,40 | 9,59 | 9,69 | 9,97 | 10,26 | 10,93 | 11,64 | 6,39 |
| MnO | 0,30 | 0,28 | 0,40 | 0,31 | 0,30 | 0,37 | 0,41 | 0,52 | 0,51 | 0,79 | 0,11 |
| MgO | 20,58 | 20,45 | 20,15 | 20,25 | 19,90 | 19,62 | 19,64 | 19,04 | 18,57 | 17,79 | 32,47 |
| CaO | 4,30 | 4,41 | 4,33 | 4,21 | 4,19 | 4,45 | 4,63 | 4,42 | 4,32 | 4,45 | 0,53 |
| Молекулярна частка, % | | | | | | | | | | | |
| Піроп | 72,6 | 72,3 | 71,4 | 71,7 | 70,7 | 69,6 | 69,8 | 67,9 | 66,5 | 64,1 | |
| Альмандин | 15,9 | 15,9 | 16,8 | 16,9 | 18,0 | 18,2 | 17,5 | 19,7 | 21,3 | 22,7 | |
| Спесартин | 0,6 | 0,6 | 0,8 | 0,6 | 0,6 | 0,7 | 0,8 | 1,1 | 1,0 | 1,6 | |
| Андрадит | 2,9 | 4,3 | 2,9 | 3,8 | 2,8 | 2,8 | 4,8 | 2,5 | 2,1 | 2,6 | |
| Гросуляр | 3,5 | 2,6 | 3,6 | 2,2 | 3,4 | 4,1 | 2,1 | 3,9 | 4,3 | 4,4 | |
| Уваровіт | 4,5 | 4,3 | 4,5 | 4,8 | 4,5 | 4,4 | 4,9 | 4,9 | 4,7 | 4,6 | |
| <i>f</i> ** | 0,190 | 0,199 | 0,201 | 0,207 | 0,213 | 0,217 | 0,222 | 0,232 | 0,248 | 0,269 | 0,100 |
| Ca [#] | 0,109 | 0,111 | 0,110 | 0,106 | 0,106 | 0,113 | 0,117 | 0,114 | 0,112 | 0,116 | |

* Середнє з 5 аналізів; до складу входить 0,04% Na₂O. ** $f = \text{Fe}/(\text{Fe} + \text{Mg})$; $\text{Ca}^{\#} = \text{Ca}/(\text{Ca} + \text{Mg} + \text{Fe})$.

лярний, характер. Причому зерна можуть бути як повністю, так і частково негомогенними. Серед піропів із перидотитових масивів так само зустрічаються як повністю, так і частково зональні. В той самий час їм у порівнянні з кімберлітовими властивий менш складний характер зональності. Як правило, зональність у них проявляється тільки по Mg й Fe. І лише в кількох масивах зафіксовано нечисленні піропи з зональним розподілом Cr, Ca, Mg й Fe.

Як було вказано вище, зерно піропу має чітко виражену хімічну зональність. Утім, воно є лише фрагментом крупнішого індивіда, причому невідомо, яка за розміром його частина (половина, чверть тощо) і з якої зони (центральної, проміжної або периферійної). Тому ми не в змозі визначити, як і якою мірою змінювався хімічний склад первинного, незруйнованого зерна (залізистість зростала або знижувалась у напрямі від центра до периферії і наскільки). А це, в свою чергу, унеможливує повноцінну генетичну інтерпретацію досліджуваного зразка й дозволяє висловити лише найзагальніші міркування з приводу його походження.

За загальними особливостями хімічного складу (магнезіальність, вміст Cr, Ti й Ca) вивчений піроп подібний до піропів з ряду порід, а саме: кімберлітів, лампроїтів, карбонатитів, лампрофірів, гранатових перидотитів тощо. Однак виявлена в ньому зональність дає змогу істотно зменшити перелік його імовірних першоджерел. Як було нами зазначено, на даний час зональні піропи встановлені лише в кімберлітових діатремах та масивах гранатових перидотитів. Зважаючи на це, саме ці геологічні утворення і мають розглядатись як можливі корінні джерела дослідженого зразка.

Для оцінки *PT*-умов утворення вивченого піропу було використано серію відомих геобарометрів та геотермометрів [11–14 та ін.]. Виконані розрахунки показали, що тиск і температура його кристалізації могли становити близько 2,0 ГПа та 800–850 °С.

Брак наявної інформації про досліджуваний піроп не дозволяє поки що робити обґрунтовані висновки стосовно походження в ньому зональності. Можемо лише припустити, що в зразку ВП-61, як і в піропах з подібною Fe–Mg зональністю з кімберлітів та гранатових перидотитів, вона найімовірніше також має не ростову, а дифузійну природу. Мається на увазі її утворення не впродовж кристалізації індивіда, а в процесі його подальшого субсолідусного перетворення в материнських породах при досить високих *PT*-параметрах.

Імовірно ще одним свідченням посткристалізаційного субсолідусного перетворення вивченого піропу є встановлені в ньому мікровключення ортопіроксену. Зважаючи на особливості морфології та хімічний склад останніх, вони найімовірніше є продуктами розпаду піропової матриці, яка їх вміщує.

Таким чином, вперше серед піропів із різновікових теригенних відкладів України виявлено зерно з чітко проявленою хімічною зональністю. На жаль, природа останньої залишається поки що не з'ясованою. Проте вже сама знахідка гранату з вказаними особливостями є, без сумніву, дуже цінною та матиме важливе значення у вирішенні питання про походження піропів із осадових порід на території правобережної України.

1. Гейко Ю. В., Гурский Д. С., Лыков Л. И. и др. Перспективы коренной алмазоносности Украины. – Киев; Львов: Центр Европы, 2006. – 223 с.
2. Мацюк С. С., Зинчук Н. Н. Оптическая спектроскопия минералов верхней мантии. – Москва: Недра, 2001. – 428 с.
3. Вишневецький О. А., Павлюк О. В., Павлюк В. М. Піропи із середньосарматських відкладів Верхнього Побужжя (Україна) // Мінерал. журн. – 2012. – 34, № 1. – С. 25–34.

4. *Соболев Н. В.* Глубинные включения в кимберлитах и проблема состава верхней мантии. – Новосибирск: Наука, 1974. – 261 с.
5. *Лазько Е. Е., Серенко В. П.* Перидотиты с зональными гранатами из кимберлитов Якутии: свидетельство высокотемпературного глубинного метасоматоза и внутримантийного диапиризма? // Изв. АН СССР. Сер. геол. – 1983. – № 12. – С. 41–53.
6. *Smith D., Boyd F. R.* Compositional zonation in garnets in peridotite xenoliths // Contrib. Mineral. Petrol. – 1992. – **112**. – P. 134–147.
7. *Brueckner H. K., Medaris L. G.* A general model for the intrusion and evolution of “mantle” garnet peridotites in high-pressure and ultra-high-pressure metamorphic terranes // J. Metamorphic Geol. – 2000. – **18**, No 2. – P. 123–133.
8. *Song S. G., Niu Y. L., Zhang L. F., Bucher K.* The Luliangshan garnet peridotite massif of the North Qaidam UHPM belt, NW China – a review of its origin and metamorphic evolution // Ibid. – 2009. – **27**. – P. 621–638.
9. *Vrabec M.* Garnet peridotites from Pohorje: Petrography, geothermobarometry and metamorphic evolution // Geologija (Ljubljana). – 2010. – **53**, No 1. – P. 21–36.
10. *Van Roermund H. L. M., Drury M. R., Barnhoorn A., De Ronde A.* Relict majoritic garnet microstructures from ultra-deep orogenic peridotites in Western Norway // J. Petrol. – 2001. – **42**, No 1. – P. 117–130.
11. *Grutter H., Latti D., Menzies A.* Cr-saturation arrays in concentrate garnet compositions from kimberlite and their use in mantle barometry // Ibid. – 2006. – **47**, No 4. – P. 801–820.
12. *Brey G. P., Kohler T.* Geothermometry in four-phase lherzolites II. New thermobarometers, and practical assessment of existing thermobarometers // Ibid. – 1990. – **31**, No 6. – P. 1353–1378.
13. *O'Neill H. S. C., Wood B. J.* An experimental study of the Fe-Mg partitioning between garnet and olivine and its calibration as a geothermometer // Contrib. Mineral. Petrol. – 1979. – **70**. – P. 59–70.
14. *Wu C. M., Zhao G. C.* A recalibration of the garnet-olivine geothermometer and a new geobarometer for garnet peridotites and garnet-olivine-plagioclase-bearing granulites // J. Metamorphic Geol. – 2007. – **25**. – P. 497–505.

*Інститут геохімії, мінералогії та рудоутворення
ім. М. П. Семененка НАН України, Київ*

Надійшло до редакції 10.09.2013

А. А. Вишнеvский

О первой находке зонального пиропа в осадочном чехле Украинского щита

Охарактеризована первая находка зонального пиропа в терригенных отложениях Украины. Зерно размером $\sim 0,3 \times 0,4$ мм является фрагментом более крупного индивида и химически негетогенно. От края до края в нем закономерно увеличивается содержание FeO (от 8,6 до 11,6%) и соответственно уменьшается содержание MgO (от 20,6 до 17,8%). При этом концентрация остальных индикаторных элементов (Ti, Ca, Cr) остается неизменной. По результатам анализа полученных данных был сделан вывод, что его коренными источниками могли быть кимберлиты либо гранатовые перидотиты ультраметаморфических комплексов. Давление и температура кристаллизации пиропа составляли около 2,0 ГПа и 800–850 °С. Что касается установленной в нем зональности, то последняя, скорее всего, является результатом его посткристаллизационного субсолидусного преобразования в материнских породах при сравнительно высоких температуре и давлении.

O. A. Vyshnevskiy

On the first finding of zoned pyrope in the sedimentary cover of the Ukrainian shield

The first finding of zoned pyrope in terrigenous deposits of Ukraine is described. The grain of $\sim 0.3 \times 0.4$ mm in size is a part of a larger crystal and chemically inhomogeneous. From side to side in them, the FeO content appropriately increases (from 8.6 to 11.6%) and MgO decreases (from 20.6 to 17.8%). Thus, the concentration of other indicator elements (Ti, Ca, Cr) remains unchanged. Based on the analysis of obtained data, it is concluded that its native sources were kimberlites or garnet peridotites of UHPM terranes, and the temperature and the pressure of crystallization were near 800–850 °C and 2.0 GPa. In respect of the zonality exposed in pyrope, it is most probable that it is a result of its subsolidus alteration in mother rocks at comparatively high temperature and pressure.

А. С. Костинский

Эволюция диссипативной структуры как модель процесса в очаге землетрясения: аналогии в живых системах и химической кинетике

(Представлено академиком НАН Украины В. И. Старостенко)

Высказывается предположение, что возникновение, эволюция и распад диссипативной структуры, подобной гексагональным ячейкам Бенара, в среде или субстанции с нелинейными свойствами, может оказаться причиной явления, воспринимаемого как очаг землетрясения. Утверждается, что эффективное описание явления осуществимо только в терминах аксиоматически построенной механики возбудимых сред, как вариант “встроенной” в схему классических кинематических очаговых моделей. Тезис проиллюстрирован сопоставлением с многообразием автоволновых процессов в биологических и химических системах.

Две ключевые позиции, две мысленные “опорные точки” должны быть выделены, когда речь идет о механике сплошных сред в существующем описании очага землетрясения. Во-первых, источник понятий и образов, связанных с сейсмическими явлениями, есть “материнские гены” полевой геологии плюс вера в то, что в глубинах Земли возможно нечто аналогичное, происходящему на поверхности. Во-вторых, “архетип” сейсмических катастроф породил представление о том, что землетрясение неизбежно связано с разрушением, *распадом* некоторой невидимой структуры. Когда видим рушащиеся здания и трещины, разрывающие землю, трудно увидеть за всем этим *образование* структуры. Но век классической традиции закончился, когда окружающий мир воспринимался как совокупность наблюдаемых объектов, движущихся под действием сил согласно определенным законам. Стало понятно (еще на заре квантовой механики), что природа действует иначе.

Очевидность физических теорий квантового, релятивистского мира есть согласованность постулатов, а о базовых понятиях принципиально невозможно составить наглядного представления, не впадая в противоречие. Решающая роль здесь принадлежит математике фундаментальных принципов, принимаемых как данность, группам преобразований и их инвариантам. То, что мы наблюдаем, есть некоторые из инвариантов в определенной системе отсчета, вектора состояния физической системы (в широком смысле, т. е. величины, полностью характеризующие систему) не обязательно совпадают с “наблюдаемыми”. Это еще один камень в фундаменте современного физического описания, и сейсмологические модели не должны быть исключением.

Поразительный пример в истории физики служит опорой в подобном стремлении. Именно осознание заряда и массы как свойств вещества исторически приходило постепенно из рутины повседневных наблюдений над взаимодействием тел, а пространственные интервалы и координаты точек, хотя и входили на равных в законы Ньютона и Кулона, все же воспринимались как составляющие иной сущности, геометрии мира. Риман различал геометрическое пространство и физическое пространство, подобное субстанции, “ответственное” за распространение тяготения и света, и допускал, что метрическая сторона геометрии,

возможно, теряет привычный смысл в бесконечно малом. По Вейлю, может порождаться, пусть в малом, и сложная топология, полностью отличная от топологии евклидова пространства. Но даже просто замкнутость в целом, хотя бы по одному из измерений, приводит к “геометродинамическим” эффектам, заставляющим предположить не пассивную, но “творящую” роль пустого пространства.

Вообразим, например, искривленный мир, топологически эквивалентный трехмерной сфере, состоящий из двух полостей, соединенных узким тоннелем (“песочные часы”). Как один из вариантов физической аксиоматики допустим, что в таком мире справедливы уравнения Максвелла. Переменное во времени свободное электромагнитное поле порождает поток силовых линий, исходящий из горловины тоннеля, дивергенция поля всюду равна нулю. Силовые линии нигде не кончаются, но наблюдатель, не располагающий микроскопом с достаточным увеличением, считающий горловину тоннеля обычной точкой своего пространства, увидит в этой точке обрыв силовых линий, т. е. элементарный электрический заряд. Этот *заряд без заряда* — динамический, он меняется и может исчезнуть для наблюдателя, “обитающего” в одной из полостей, если петли силовых линий уйдут через горловину в соседнюю полость. В пространстве с многосвязной топологией силовые линии, заключенные в ручки, не могут уменьшиться в числе, поток из горловины ручки не меняется со временем, и гипотетический наблюдатель отметит неизменность константы движения, воображаемого, но реально не существующего заряда [1]. Если искать аналогии, может быть, подобная “абберация зрения” существует и в восприятии сейсмологических конструкций?

История представлений о происходящем в очаге землетрясения, если принять за начало отсчета теорию упругой отдачи Рейда, насчитывает век. К настоящему моменту можно, взглянув как бы извне, представить себе нечто целое, мир, *универсум* очаговых моделей просто как множество элементов, или абстрактных точек (не в геометрическом смысле). Подобная отстраненность неизбежно предшествует изменению языка, в согласии с тем, что постепенно неумовимо меняется характерный масштаб, наша обиходная, повседневная позиция в мысленном пространстве-времени, в котором продолжается существование моделей, хотя их эволюция кажется завершенной.

Явно можно выделить некий центр, образ распространяющейся круговой трещины сдвига, и “нефизическое” решение самоподобной задачи [2]

$$\Delta U^s(\rho, t) = \Delta V \sqrt{t^2 - \left(\frac{\rho}{\nu}\right)^2} H\left(t - \frac{\rho}{\nu}\right), \quad \Delta V, \nu = \text{const}, \quad (1)$$

бесконечно возрастающее со временем. Если (1) принимать как исходную точку в воображаемом пространстве логики моделирования, ткань сопутствующей топологии включает в себе “окрестность”, модели, полученные усовершенствованием (1), “обрезанием” процесса в пространстве и времени [3, 4]. Но если мы тем или иным образом меняем (1), то неявно подразумевается, может быть принципиальное, изменение природы физического объекта, который таким образом описывается. Это уже не только не будет круговая распространяющаяся трещина сдвига, но, не исключено, реальность, от нее произвольно далекая. Но что же это?

Зададимся вопросом: если спорна возможность использовать теорию упругости как базу описания очаговых процессов, то что можно считать бесспорным? Только одно, представление об очаге как о нелинейной распределенной открытой системе, далекой от термодинамического равновесия. Само по себе это не ново и мало что дает. Перерезав “пугови-

ну”, связывающую с повседневным опытом, мы вынуждены будем допустить, что очагом землетрясения, т. е. источником волн, приходящих в точку наблюдения, может быть любая меняющаяся во времени особенность поля любой характеристики среды. “Особенность” означает наш уровень описания, с точки зрения физики точечных или распределенных на плоскостях сущностей с самого начала нет.

Следующий шаг, конечно, должен заключаться в признании, что особенности может не быть и в описании, вполне допустимо представить себе возникающую и затем исчезающую более или менее отчетливо локализованную область, которая, до того как исчезнуть, успевает послать в среду импульс резкого изменения, хронику своей самоорганизации. Способное к самоорганизации “нечто” нельзя уже назвать просто средой, в традиционной постановке вопроса среда должна содержать сейсмический источник, принципиально с ней не сходный. Среда, или субстанция, теперь в некотором смысле однородна и означает не более как одну из возможных, интуитивно определяемых, лишенных отчетливости, последовательных стадий эволюции, что-то напоминающее период спокойного Солнца. Это “нулевая конфигурация”, и тогда “очаг землетрясения” по определению есть ее возмущение. “Земной” опыт в любом случае остается первоосновой, но все же следует быть готовым к тому, что описание происходящего в субстанции принципиально невозможно как экстраполяция явлений на поверхности. Тогда остается не подлежащим сомнению только сам факт появления возмущения “нулевой конфигурации”, способность субстанции генерировать и распространять *возбуждение*, т. е. состояние, дополнительное по отношению к основному состоянию.

В биологии и химии привычна ситуация, когда кооперативное поведение систем, различных по своей природе, сходно. Железная проволока в стеклянной трубке, заполненной азотной кислотой, обнаруживает свойства, напоминающие свойства нервных волокон: если в каком-то месте зачистить проволоку, убрав пленку окисла, царापина “побежит” вдоль проволоки с некоторой постоянной скоростью [5]. Другой пример: две ячейки, заполненные электролитом разной концентрации и разделенные мембраной из пористого стекла, это устройство известно как мембранный осциллятор Теорелла. С помощью внешних электродов пропускается постоянный ток, при больших токах возникают периодические колебания мембранного потенциала и сдвинутые по фазе колебания уровня жидкости, система переходит в режим возбуждения, подобно биологическому объекту.

Если отвлечься от конкретной природы системы, можно ли определить общее в этих и других похожих явлениях? Очевидно, общее здесь — способность к генерации и распространению возбуждения, дополнительного (по отношению к основному) состояния. Если мы оставляем это свойство единственным характерным для системы, то мы описываем происходящее на высшей степени абстракции, как эволюцию возбудимой среды [6].

Не универсальный, но один из мыслимых механизмов очага представляется в таком случае как самоорганизация возбудимой среды слоя, самопроизвольное возникновение и эволюция устойчивой в течение некоторого времени регулярной структуры. Если рассматривать слой как нелинейную, открытую, далекую от термодинамического равновесия систему с распределенными параметрами, не кажутся странными конвективные решетки, подобные шестигранным ячейкам Бенара, автономные локализованные источники волн или распространение уединенного фронта возбуждения. Мир автоволновых явлений велик, и трудно избавиться от ощущения: именно этой “ткани” так не хватает “остову” кинематических моделей (табл. 1).

Теперь логичен вопрос: если так, то классические очаговые модели [3, 4] чужеродны подобному взгляду на вещи, безнадежно отбрасываются и надо начинать “с чистого листа”,

или все же нечто в основе своей, пусть на время, останется и есть смысл, пусть в рамках половинчатых, непоследовательных теорий, взглянуть с других точек зрения?

Мы записываем, например, разложение вектора скачка смещения $[\mathbf{U}(\dots)]$ в произвольной точке плоской площадки разрыва Σ —

$$[\mathbf{U}(\dots)] = \mathbf{n}([\mathbf{U}(\dots)]\mathbf{n}) + \mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times [\mathbf{U}(\dots)]),$$

Таблица 1. “Несущие конструкции” структуры кинематических очаговых моделей и “мозаичный узор” автономных динамических режимов

| Сейсмология | Химия, биология, биофизика |
|--|--|
| Зарождение “с нуля” сейсмического источника в виде плоской области или площадки разрыва: меняющийся во времени, непрерывно распределенный вектор скачка смещения, или трещина сдвига, нечто не существовавшее ранее даже в зародыше появляется в произвольной невыделенной точке однородной изотропной упругой среды | Генерация химических волн точечным источником: пейсмекер, ведущий центр, “эмиттер” спиральной волновой структуры (ротор) возникает как “диффузионная неустойчивость” в параметрически однородной среде, локальная неоднородность (“гетерогенный центр”), реагирующая или каталитическая частица, просто особые граничные условия [7] |
| Прямоугольная площадка разрыва, один из размеров которой гораздо больше другого, однонаправленное распространение процесса в модели Хаскелла [8] | Бегущий фронт возбуждения в аксоне кальмара, в волокне скелетных мышц, динамика автоколебательной реакции окисления в длинных трубках [9] |
| Видение и описание сейсмического источника как равноразмерного, равнонаправленного: разрыв растет радиально во всех направлениях на плоскости, произвольным образом ориентированной в среде [3, 4] | Картина “стрелковой мишени”: ситуация на территории, которая поражается эпидемией, исходящей из постоянного очага инфекции, поле агрегирующих амёб, которые собираются к клетке, выделяющей АМФ, активность эктопического фокуса сердца, волны потенциала действия, нарушающие нормальный ритм сердечных сокращений в ситуациях сбоя в функционировании синусного узла |
| Расширение эллиптической трещины, сохраняющей форму неизменной, как модель переменного во времени и пространстве скачка смещения [2, 4] | Концентрические кольцевые волны в химических системах [10] |
| Модель кругового разрыва, дополненная аппроксимацией релаксационного источника: скольжение в точке останавливается информаций от краев разрыва, фронт процесса, залечивающего разрушение, движется внутрь области после того, как разрастание наружу прекращается [11] | Пейсмекерная активность агрегирующих амёб: начальный импульс запускает окружающее кольцо, волна от которого сходится опять к центру, и запускает его снова, процесс продолжается [12], заторможенная кинетика в анестезированном сегменте нервного волокна: “тлеющая” область может вызвать возбуждение в направлении, обратном тому, откуда пришло исходное [13] |
| Различные варианты описания остановки распространяющегося разрыва [3, 4] | Различные ситуации, обнаруживающие эффект ингибированной возбудимости: химически инертный наполнитель, слишком резкий переход, чувствительное к температуре критическое отношение диаметров в местах разветвления нервных волокон, возбуждение не преодолевает порог самоподдерживающегося распространения, импульс затухает [14], переменный диаметр канала распространения, приходящий импульс не затухает полностью, но может замедлиться и остановиться, тлея “в нерешительности” [15] |

единичная нормаль \mathbf{n} постоянна по направлению. Фактически то, моделью чего является площадка, есть “сэндвич” из двух слоев “элементарных” частиц, или физически бесконечно малых объемов среды, иначе скачок смещения в этой области представить невозможно. Предположив, что реален именно “сэндвич”, а не мысленный разрез среды, сместившись таким образом к абстрактной, но физической архитектуре, мы оказываемся в начале по необходимости долгого пути, этот путь заключается в постепенном изменении, “перерождении” ткани привычного, наглядного кинематического моделирования.

Как вариант, даже не “сэндвич”, а физически бесконечно тонкий слой некоей субстанции, вложенный в “среду–термостат”, глобально не меняющую характеристик, пройдя через “призму” обыденного восприятия, “перевосплощается” в образ внутренней поверхности с распределенным, зависящим от времени скачком смещения. Описание такого слоя–источника обычным путем, “со стороны вещества”, т. е. конструирование уравнений состояния слоя и “среды-термостата”, с последующим совмещением через подходящие граничные условия, с самого начала кажется бесперспективным. Проблема не в том, что материя слоя недоступна для непосредственного исследования. В конце концов о верхней мантии и астеносфере известно достаточно много, и вполне допустима вероятность влияния тектоники плит только через граничные условия для приблизительно однородной по своим свойствам зоны. Но исходная принципиальная открытость и нелинейность системы делают бесконечным набор возможностей, приводящих к возмущению “нулевой конфигурации” слоя. Фактически остается способность генерировать и передавать возмущение или, иначе, *возбуждение*, состояние, дополнительное по отношению к основному состоянию, как единственное не подлежащее сомнению свойство вещества слоя.

Сложность состоит еще и в том, что “строительные блоки” кинематических моделей настолько хорошо согласованы, так тщательно пригнаны друг к другу, что радикально изменить один из них, не трогая остальные, невозможно. Немыслимо, например, наделить толщиной поверхность, в точках которой терпит скачок смещение, до тех пор, пока речь идет в строгом смысле слова о скачке смещения. Неизбежен поэтому этап “непоследовательных” моделей, для которых основные соотношения кинематики сейсмических источников формально останутся без изменения, но понимание их станет другим. Более того, ответ на вопрос, что считать пониманием, должен стать другим, следуя общей тенденции, так же как аксиоматика и согласованность постулатов в квантовом, релятивистском мире заменили ньютоновские “атомы”, составляющие “вещество” классических физических теорий.

Таким образом, заранее исключив возможность каких-либо наглядных представлений, мы оказываемся в ситуации, когда выбора, по сути, нет, в нашем распоряжении остается только аксиоматика как метод и принципы, универсальность которых не вызывает сомнения, даже если доказательств этой универсальности не существует. Аналогии, примеры “восхождения” к абстракции возбудимых сред в сопредельных областях знания здесь, несомненно, важны, как немногие возможные ориентиры на этом пути. Собрать воедино пусть не всеобъемлющую, но достаточно разнообразную коллекцию таких аналогий, поставить рядом с возникшими совершенно независимо мысленными образами кинематического очагового моделирования, в этом видится цель настоящей заметки.

1. Мизнер Ч., Уилер Дж. Классическая физика как геометрия // Альберт Эйнштейн и теория гравитации. – Сб. статей. – Москва: Мир, 1979. – С. 542–554.
2. Burridge R., Willis J. The self-similar problem of the expanding elliptical crack in an anisotropic solid // Proc. Cambr. Phil. Soc. – 1969. – 66. – P. 443–468.

3. *Sato T., Hirasawa T.* Body wave spectra from propagating shear crack // *J. Phys. Earth.* – 1973. – **21.** – P. 415–431.
4. *Dahlen F. A.* On the ratio of P-wave to S-wave corner frequencies for shallow earthquake sources // *Bull. Seism. Soc. Amer.* – 1974. – **64.** – P. 1159–1180.
5. *Волькенштейн М. В.* Биофизика. – Москва: Наука, 1988. – 591 с.
6. *Романовский Ю. М., Степанова Н. В., Чернавский Д. С.* Математическая биофизика. – Москва: Наука, 1984. – 304 с.
7. *Филд Р., Бургер М.* Колебания и бегущие волны в химических системах / Пер. с англ. – Москва: Мир, 1988. – 720 с.
8. *Haskell N. A.* Elastic displacements in the near-field of a propagating fault // *Bull. Seism. Soc. Amer.* – 1969. – **59.** – P. 865–908.
9. *Жаботинский А. М.* Концентрационные автоколебания. – Москва: Наука, 1974. – 178 с.
10. *Orbán M.* Chemical oscillation during the uncatalyzed reaction of aromatic compounds with bromates. 4. Stationary and moving structures in uncatalyzed oscillatory chemical reactions // *J. Am. Chem. Soc.* – 1980. – **102,** No 13. – P. 4311–4314.
11. *Molnar P., Tucker B. E., Brune J. N.* Corner frequencies of P- and S-waves and models of earthquake sources // *Bull. Seism. Soc. Amer.* – 1973. – **63.** – P. 2091. – 2104.
12. *Pate E. F., Odell G. M.* A computer simulation of chemical signaling during the aggregation phase of *Dictyostelium discoideum* // *J. Theor. Biol.* – 1981. – **88,** No 2. – P. 201–208.
13. *Antzelevitch C., Jalife J., Moe G. K.* Characteristics of reflection as a mechanism of reentrant arrhythmias and its relationship to parasystole // *Circulation.* – 1980. – **61,** No 1. – P. 182–191.
14. *Westerfield M., Joyner R. W., Moore J. W.* Temperature-sensitive conduction failure at axon branch points // *J. Neurophysiol.* – 1978. – **41,** No 1. – P. 1–8.
15. *Joyner R. W., Westerfield M., Moore J. W.* Effects of cellular geometry on current flow during a propagated action potential // *Biophys. J.* – 1980. – **31,** No 2. – P. 183–194.

Отдел сейсмологии Института геофизики
им. С. И. Субботина НАН Украины, Симферополь

Поступило в редакцию 09.09.2013

О. С. Костінський

Еволюція дисипативної структури як модель процесу в осередку землетрусу: аналогії в живих системах і хімічній кінетиці

Висловлюється припущення, що виникнення, еволюція і розпад дисипативної структури, подібної гексагональним коміркам Бенара, в середовищі або субстанції з нелінійними властивостями, може виявитися причиною явища, що сприймається як осередок землетрусу. Стверджується, що ефективний опис явища здійснений тільки в термінах аксіоматично побудованої механіки збудливих середовищ, як варіант “вбудованої” в схему класичних кінематичних осередкових моделей. Теза проілюстрована зіставленням з різноманітними автохвильових процесів у біологічних і хімічних системах.

A. S. Kostinsky

Evolution of a dissipative structure as a model of the process in an earthquake focus: analogies in living systems and chemical kinetics

The assumption is made that the emergence, evolution, and decay of a dissipative structure similar to hexagonal Benard cells in a media or a substance with nonlinear properties may cause a phenomenon perceived as the earthquake focus. It is asserted that an effective description of the phenomenon is only feasible in terms of axiomatically built mechanics of excitable media, as an option of the classical kinematic focus models “embedded” in the scheme. The thesis is illustrated by the juxtaposition with a variety of autowave processes in biological and chemical systems.

М. И. Орлюк, А. А. Роменец, И. М. Орлюк

Низкочастотный техногенный магнитный шум в г. Киев*(Представлено академиком НАН Украины В. И. Старостенко)*

Изложены результаты исследований переменного магнитного поля техногенного происхождения в г. Киев. Впервые экспериментально исследована техногенная составляющая магнитного поля в частотном диапазоне 10^{-6} –1 Гц. Показано, что источники техногенных вариаций величиной в десятки и сотни нанотесла имеют в большинстве случаев электрический и ферромагнитный характер. Суточная ритмика техногенных источников обуславливается рабочим режимом людей и производства.

В ряде публикаций приведены данные о влиянии постоянного магнитного поля (МП), а также его вариаций в широком диапазоне частот на живые организмы в целом и жизнедеятельность человека [1–3]. Общеизвестно, что в крупных мегаполисах природное магнитное поле Земли (МПЗ) существенным образом дополняется техногенной составляющей от разных источников постоянного и переменного характера [4]. К постоянным источникам относятся разнообразные технические сооружения (здания, производственные помещения, мосты, дороги и т. д.). Внутри зданий источниками техногенного искажения являются ферромагнитные элементы железобетонных конструкций (стен, пола, межэтажных перекрытий), а также отопительных и сантехнических сетей [4, 5]. Естественно, что изучение таких помех имеет как определенный экологический аспект, так и чисто магнитный с целью оценки и исключения из обсерваторских наблюдений имеет как определенный экологический аспект, так и чисто магнитный [6, 7].

Объект исследований. Переменное магнитное (электромагнитное) поле природного и техногенного происхождений изменяется в пределах от 10^{-6} Гц до 10 ГГц [8]. Наибольший вклад в техногенный электромагнитный шум на низких частотах (от 0,5 Гц до 400 кГц) вносятся основными потребителями электрического тока промышленной частоты [6]. Наименее исследованными в экспериментальном отношении остаются техногенные источники на частотах 10^{-6} –1 Гц. Заметим, что в этом диапазоне частот производится запись вариаций МПЗ в магнитных обсерваториях, что позволяет выполнить их сравнительную характеристику. Поэтому представляется весьма актуальным изучение техногенной составляющей МП на указанных частотах, которое может быть связано с движущимися ферромагнитными и электрическими источниками (машины, трамваи, троллейбусы, электрички, электропоезда метро и т. д.), а также с некоторыми производственными процессами, использующими оборудование на постоянном токе и т. д.

Аппаратура и методика измерений. Для изучения техногенной компоненты поля использовалась серийная аппаратура ЛФ Института космических исследований НАН Украины — магнитовариационная станция Lemi-008 [9]. Данный прибор измеряет ортогональные компоненты МП с общим диапазоном измерений поля ± 65 мкТл и вариаций — $\pm 2,5$ мкТл. Указанный диапазон измерений не позволяет исследовать более интенсивные техногенные источники, поэтому для грубой их оценки применялся портативный магнитометр на базе операционной системы Android. Магнитометр имеет в своем составе в качест-

ве измерителя блок магниторезисторов (принцип изменения сопротивления от положения в пространстве) или элементы Холла.

Для измерений с помощью Lemi-008 применялась стандартная методика наблюдений вариаций МПЗ, а именно: прибор устанавливался в определенном пункте с ориентацией датчика на магнитный север и регистрировались B_x -, B_y -, B_z -компоненты МП с интервалом 1 с.

С помощью программного обеспечения MagneticSolution на базе Android измерения магнитного поля выполнялись в движении с его регистрацией в микротесла и дальнейшей графической визуализацией путем несложных преобразований числовых данных.

Результаты исследований. Измерения вариаций магнитного поля выполнены в шести пунктах наблюдения (ПН), распределенных более-менее равномерно в пределах правобережной части Киева в производственных и подсобных помещениях на просп. Палладина, улицах Фрунзе, Гарматная, Боженка, Большая Окружная и Васильковская. В данном сообщении рассмотрены ПН с наибольшими величинами техногенной компоненты МП.

Заметим, что анализ техногенных источников показал максимальное их проявление в вертикальной составляющей магнитной индукции B_z , что позволяет нам ограничиться ее рассмотрением. Регистрация магнитных вариаций в ПН проводилась в ноябре–декабре 2012 г. — январе–феврале 2013 г. на протяжении 2–3-х сут в каждом из них.

ПН по ул. Фрунзе. Проведенные измерения вариаций магнитного поля показали наличие помех разного характера и периодичности (см. *а* на рис. 1). Сравнительная характеристика с вариациями по данным геомагнитной обсерватории (ГО) “Киев” (как правило, они изменяются в пределах первых десятков нанотесла) показывает наличие трех периодов отклонений МП от нормы (измерения проводились по мировому времени по Гринвичу UTC, но с целью практического восприятия данных в результативных материалах приведены вариации магнитного поля по Киевскому времени): 27.11.2012 с 15.27 (начало измерений) до 18.30 — ~ 700 нТл; 28.11.2012 с 8.30 до 18.30 — ~ 800 нТл; 29.11.2012 с 8.30 до 15.04 (конец измерений) — ~ 1000 нТл. Судя по характерному виду кривой B_z -компоненты, помеха вероятнее всего, электрического происхождения.

На протяжении всего периода измерений B_z -компонента — пилообразного вида, что свидетельствует о наличии постоянных механических или электромагнитных помех, вызванных, вероятно, движением автомобилей и наличием действующей трамвайной линии. Обнаруженные возмущения (до 300–500 нТл) МП, связанные, как выяснилось в последствии, с помехами от шиферного производства, точнее — от запуска печей для обжига. Следовательно, нахождение вблизи подобного производства дает постоянное достаточно интенсивное искажение МП, в десятки раз превосходящее по интенсивности возмущения при магнитной буре.

ПН по ул. Боженка. Существенные отклонения от вариаций на обсерватории наблюдаются (см. *б* на рис. 1): 09.01.2013 с 15.13 (начало измерений) до 24.45 — ~ 350 нТл; 10.01.2013 с 5.40 до 24.45 — ~ 450 нТл; 11.01.2013 с 5.40 до 14.47 (конец измерений) — ~ 350 нТл. Четко выделяются три периода возмущений МП. График изменения B_z -компоненты пилообразного синусоидального вида (максимум отклонения от “нормы” приходится на ~ 15.00 – 15.30), что свидетельствует о наличии постоянных электромагнитных помех, вызванных скорее всего работой какой-либо аппаратуры (измерения проводились в Институте электросварки им. Е. О. Патона НАН Украины). Близость интенсивных транспортных потоков (ул. Боженка и Федорова) тоже влияют на общий характер протекания помех. Как и в предыдущих случаях были зарегистрированы высокоинтенсивные до 100–150 нТл высоко-

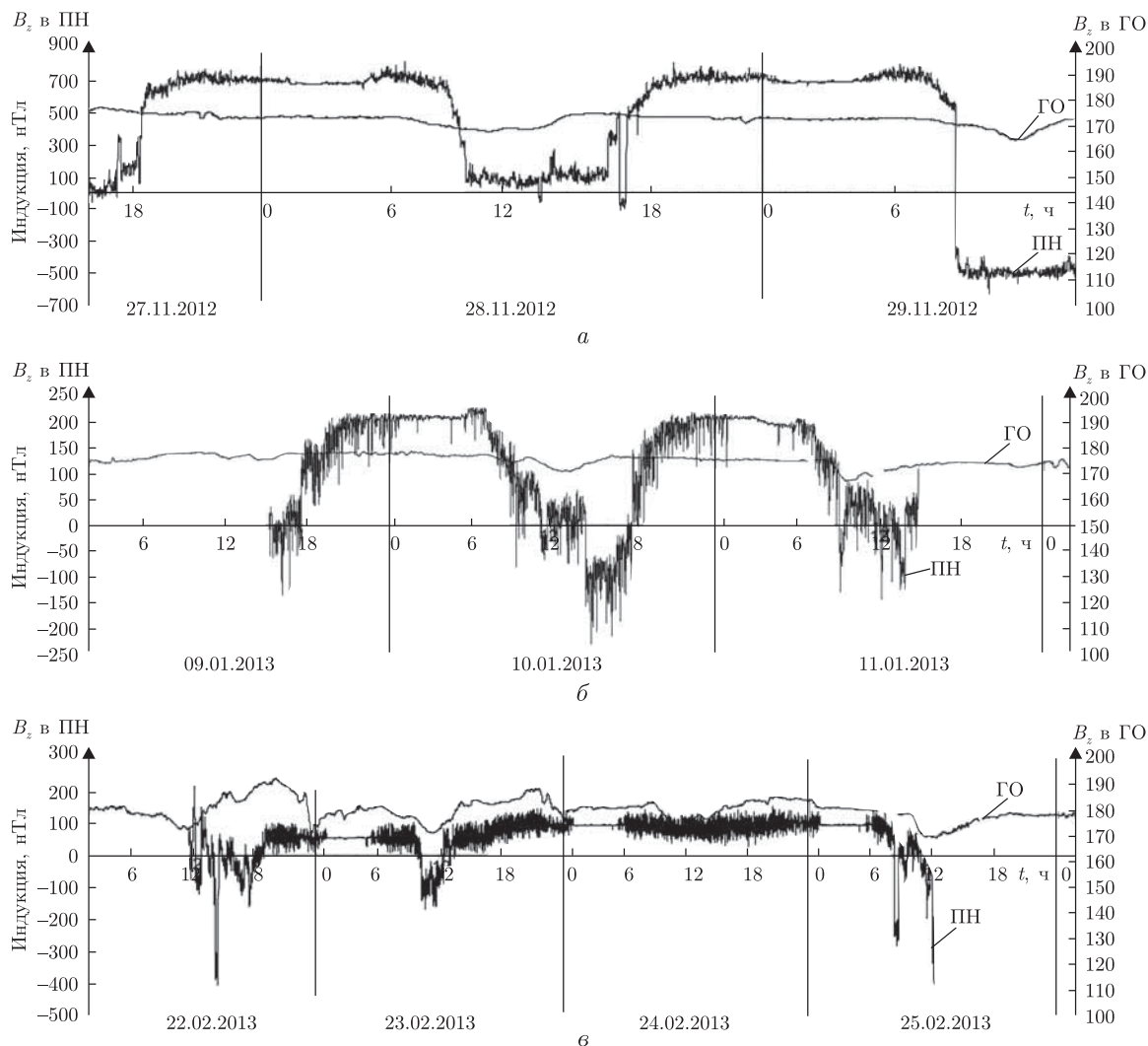


Рис. 1. Графики вариаций B_z -компоненты магнитного поля в исследуемых пунктах наблюдения и на ГО “Киев”: ул. Фрунзе (а); ул. Боженка (б); ул. Васильковская (е)

частотные возмущения МП. Также выделяются периоды (преимущественно в ночное время суток $\sim 0,45-5,40$), когда МП имеет в основном спокойный характер.

ПН по ул. Васильковской. Наибольшие вариации техногенного происхождения наблюдаются в следующих интервалах (см. е на рис. 1): 22.02.2013 — 23.02.2013 с 11.37 (начало измерений) до 01.10 — ~ 600 нТл, а также 23.02.2013 — 24.02.2013 с 05.20 до 01.10 — ~ 250 нТл; 24.02.2013 — 25.02.2013 с 03.20 до 01.10 — $\sim 80 - 100$ нТл и с 05.20 до 12.00 (конец измерений) — ~ 550 нТл. Следует отметить, что аномальные значения в период 23 и 24 февраля (выходные дни) несколько ниже, чем в период 22 и 25 февраля. Указанные промежутки — четкой периодичности, что позволяет предположить регулярный характер их возникновения (вероятнее всего — это эффект от метро). В периоды 22.02.2013 — 23.02.2013 ($\sim 23.10-3.20$), 23.02.2013 — 24.02.2013 ($\sim 23.10-3.20$), 24.02.2013 — 25.02.2013 ($\sim 23.10-3.20$) МП имеет спокойный характер и существенно не отличается от такового на ГО “Киев”. Нужно заметить что периоды спокойного протекания МП приурочены к ночному времени

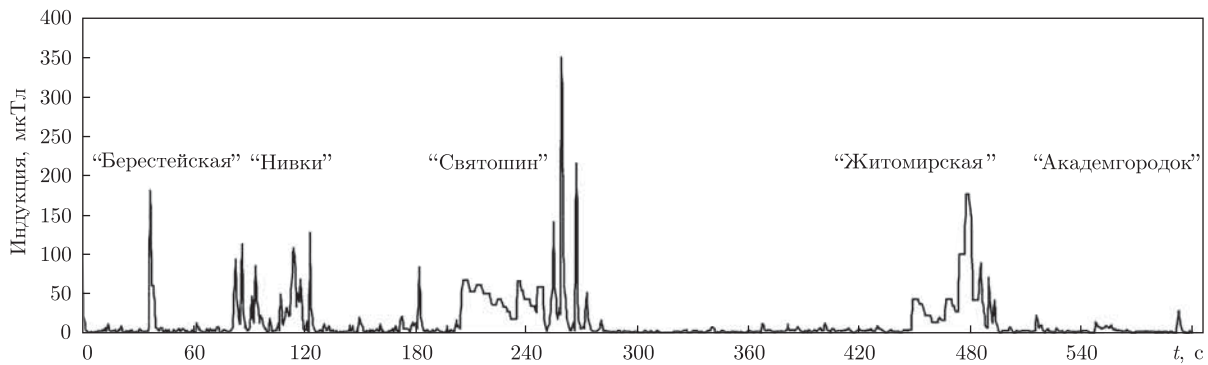


Рис. 2. Вариации индукции магнитного поля B в вагоне метро на перегоне между станциями “Берестейская” — “Академгородок”

суток. Периоды суток ($\sim 05.20-24.10$) характеризуются также пилообразными высокочастотными возмущениями МП до 150 нТл, что характеризует “насыщенность” этих промежутков времени разнообразными магнитными “шумами”. Интересным представляется некоторое усиление в техногенном поле суточной вариации, которое наблюдается, в частности, 10.01.2013 (см. в на рис. 1).

ПН метро. Измерения вариаций магнитного поля в метро проводились на отрезке станций “Берестейская” — “Академгородок”. На графике (рис. 2) хорошо видны величины и периоды возрастания МП в пределах 40–350 мкТл на станциях метро. Заметим, что прежде всего индукция B , обуславливается электродвигателями, расположенными в центре каждого вагона, и резко возрастает во время ускорения поезда. Однако кроме электродвигателя поезда на величину B влияют также конструкции туннелей метро, подземные и надземные коммуникации. Это четко видно из графика, в частности в районе ст. “Святошино”, расположенной в месте крупной транспортной развязки.

Таким образом, нами впервые экспериментально исследована техногенная составляющая магнитного поля в г. Киев для периодов от 1 с до 24 ч ($10^{-6}-1$ Гц). Зарегистрированные разнопериодные техногенные вариации имеют амплитуды в десятки и сотни нанотесла и существенно отличаются от вариаций МП на магнитной обсерватории “Киев”. Особо большие значения индукции B (до 100–350 мкТл) зарегистрированы в метро в начале движения или торможения поезда.

Источники техногенных вариаций имеют в большинстве случаев электрический и ферромагнитный характер: связаны с включением/выключением и работой источников постоянного тока, движением электрического транспорта, включительно в метро, а также механическим перемещением разнообразных транспортных средств. Заметная суточная ритмика техногенных источников обуславливается рабочим режимом людей и производства. Следовательно, можно говорить, что в городских условиях человек постоянно находится под воздействием средней (а в некоторых местах — временами сильной) магнитной бури.

1. Павлович Н. В., Павлович С. А., Галлиулин Ю. И. Биоманнитные ритмы. – Минск: Университетское, 1991. – 136 с.
2. Орлюк М. І. Геофізична екологія – основні задачі та шляхи їх розв’язку // Геофіз. журн. – 2001. – 23, № 1. – С. 49–59.
3. Белокриницкий В. С. Что необходимо знать пользователям мобильных телефонов и компьютеров. – Киев: Ун-т “Украина”, 2009. – 112 с.

4. Орлюк М. І., Роменець А. О. Магнітне екологічне поле мегаполісу (на прикладі м. Києва) // Екологія і природокористування. – 2004. – Вип. 7. – С. 142–147.
5. Резинкина М. М., Пелевин Д. Е., Думанский Ю. Д., Биткин С. В. Ослабление геомагнитного поля в многоквартирных домах различных проектов // Гігієна насел. місць. – 2009. – № 54. – С. 209–216.
6. Тягунов Д. С. Техногенное электромагнитное поле как экологический фактор // Экология урбанизированных территорий. – Москва: Б. и., 2011. – № 2. – С. 45–50.
7. Гвишиани А. Д., Соловьев А. А., Агаян С. М., Богоутдинов Ш. Р., Сидоров Р. В. Алгоритмическая система распознавания выбросов на магнитограммах // Динамика физических полей Земли. – Москва: Светоч Плюс, 2013. – С. 297–310.
8. <http://www.gigagertz-solutions.com>.
9. Корепанов В., Беркман Р., Бест А. та ін. Експериментальні дослідження стабільності ферозондових магнітометрів // Укр. метрол. журн. – 1999. – Вип. 3. – С. 23–25.

Институт геофизики им. С. И. Субботина
НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 28.08.2013

М. І. Орлюк, А. О. Роменець, І. М. Орлюк

Низькочастотний техногенний магнітний шум в м. Київ

Викладено результати досліджень змінного магнітного поля техногенного походження в м. Київ. Вперше експериментально досліджено техногенну складову магнітного поля в частотному діапазоні 10^{-6} –1 Гц. Показано, що джерела техногенних варіацій величиною в десятки і сотні нанотесла мають в більшості випадків електричний і феромагнітний характер. Добова ритміка техногенних джерел обумовлюється робочим режимом людей і виробництва.

M. I. Orlyuk, A. A. Romenets, I. M. Orliuk

Technical low-frequency magnetic noise in Kiev

The technical nature of magnetic field variations researched in Kiev is presented. The man-made component of the magnetic field in the frequency range from 10^{-6} Hz to 1 Hz is experimentally studied for the first time. It is shown that technological variation sources which have intensity of tens and hundreds of nanoteslas mostly have electrical and ferromagnetic nature. People and manufacture timetables cause the circadian rhythm of technological variations.

С. А. Станкевич, О. В. Титаренко

Виділення осей синфазності на сейсмограмах за допомогою одновимірного перетворення Радона

(Представлено членом-кореспондентом НАН України О. Д. Федоровським)

Запропоновано алгоритм автоматичного виділення лінійних осей синфазності на сейсмограмах на основі одновимірного дискретного перетворення Радона і плоскої агломеративної кластеризації. Алгоритм забезпечує достовірність, прийнятну для сейсморозвідки. Використання розробленого алгоритму дозволить удосконалити автоматизовану обробку даних сейсморозвідки та підвищити об'єктивність їх інтерпретації.

Останнім часом у нафтовій і газовій промисловості спостерігається необхідність збільшення темпів видобутку вуглеводнів, що спричинює зростання витрат на пошуки та розвідку родовищ. У зв'язку з цим, методи прогнозу й оцінювання припустимих покладів вуглеводнів до буріння свердловин набувають більшої актуальності.

Усі геологорозвідувальні роботи, що спрямовані на прямий пошук покладів вуглеводнів, практично так або інакше пов'язані з сейсморозвідкою. Сейсмічна розвідка — реєстрація поширення в земній корі штучно згенерованих сейсмічних коливань з подальшою математичною обробкою отриманих даних [1]. За останнє десятиріччя в сейсморозвідці на відбитих хвилях відзначений якісний стрибок в методиці й практиці робіт. Перехід на цифрову реєстрацію при польових спостереженнях, цифрова обробка, що безперервно удосконалюється, та новітні методи аналізу сейсмічних даних забезпечили значне підвищення якості отриманих результатів. У міру розвитку та вдосконалення методів обробки сейсмічних даних виникла гостра необхідність у створенні нових способів їх автоматизованої інтерпретації, що базуються на використанні всього обсягу корисної інформації.

Тому всебічне вивчення будови та нафтогазоносності регіону для пошуково-розвідувальних робіт сейсморозвідкою, спрямованих на виявлення і розвідку нових покладів нафти і газу з метою стабілізації видобутку та забезпечення приростів розвіданих запасів вуглеводнів на перспективу, є важливим і нагальним науково-практичним дослідженням.

Геологічні утворення продуктивного розрізу — в осадовому чохлаі або в корі вивітрювання фундаменту над покладами вуглеводнів та навколо них — епігенетично змінені за складом, структурою, фізичними властивостями [2]. У продуктивному розрізі над покладом вуглеводнів формується область сліду дифузійно-ефузійного потоку, яка відображається в фізичних полях, особливо в сейсмічному полі, на амплітудах хвиль відбиття. В самому покладі вуглеводнів, де відбувається підвищене поглинання сейсмічних хвиль, амплітуда хвиль відбиття зменшується. Навколо покладів вуглеводнів на водно-нафтових та газодних контактах утворюються високоамплітудні різкоградієнтні хвилі відбиття. Область сліду дифузійно-ефузійного потоку, що формується над покладом вуглеводнів, складається з відновної зони безпосередньо над цим покладом та окисної зони вище по розрізу. Відновна зона характеризується підвищеною літолого-мінералогічною й фізичною диференційованістю та підвищеною в цілому акустичною жорсткістю, тому в сейсмічному полі виділяється

значно збільшеними амплітудами хвиль відбиття — частим утворенням “яскравої плями” на сейсмічних зображеннях, часових розрізах сейсмограм (рис. 1).

Для виділення таких “плям” сейсмічні дані беруть в інтервалах запису, більших за інтервал розташування покладу вуглеводнів, та вздовж осей синфазності найбільш чітко корельованих відбиттів у межах всього часового розрізу профілю дослідження: від верхньої його частини до глибини розташування продуктивних відкладів (рис. 2).

На даний час ефективним інструментом виділення параметризованих ліній і фігур на цифрових зображеннях є перетворення Хо [3], що належить до інтегральних перетворень, тому воно має властивість придушення шумів. Оскільки вздовж ліній проводиться інтегрування, відношення сигнал/шум підвищується в порівнянні з вихідним зображенням, і цільові фігури виявляються з більшою вірогідністю [4]. Перетворення Хо для прямих еквівалентне перетворенню Радона, для обчислення якого розроблені ефективні алгоритми [5]. Класичне двовимірне перетворення Радона $H(\cdot)$ відображає задану на площині функцію $f(x, y)$ у безлічі її лінійних інтегралів [6]:

$$H(x, y, \theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x + t \cos \theta, y + t \sin \theta) dt. \quad (1)$$

Це перетворення є інтегралом функції $f(x, y)$ уздовж прямої, що проходить через точку (x, y) у напрямі θ . Дискретне перетворення Радона (ДПР) дозволяє стійко детектувати напрями ліній, що переважають, у довільних точках цифрових зображень в умовах перешкод і сітчастих структур [7]. Також перетворення Радона, поряд з перетворенням Фур’є й деякими іншими, часто застосовується в геофізиці для аналізу сейсмічних сигналів [8]. Застосування ДПР з параметром $\theta = 0$ до типової сейсмограми, наведеної на рис. 1, ілюструє рис. 3.

У більшості випадків сейсмічний розріз може бути описаний більш-менш регулярною лінійною багатошаровою структурою. У цьому разі результатом застосування ДПР з напрямом θ , паралельним переважному напрямку шарів, до вихідної сейсмограми буде квазі-періодичний сигнал, максимуми якого відповідають осям синфазності. Залишається лише коректно виділити ці максимуми на діаграмі вказаного перетворення.

З цією метою пропонується використовувати плоску агломеративну кластеризацію з нарошуванням зв’язних компонентів [9]. Алгоритм детектування осей синфазності сейсмограми включає такі кроки:

- визначення частоти характерної гармоніки функції $H(x, y, \theta)$ за допомогою стандартної процедури MESE (maximum entropy spectral estimation) [10];

- визначення порогу кластеризації за умов лінійності або нормальності розподілу відхилень гармонійного сигналу [11]; при необхідності дослідник може задати значення порогу кластеризації вручну;

- відбір значень $H(x, y, \theta)$, що перевищують поріг кластеризації;

- розбиття дібраних значень на послідовно зв’язані кластери;

- вибір осей синфазності в кожному із кластерів як координати максимуму сигналу кластеру; у випадку кількох максимумів брали найближчий до медіани кластеру.

Перевірку працездатності описаного алгоритму проведено на вибірці з 24 типових сейсмограм реальних відбиваючих розрізів. Кожна сейсмограма містила кілька сотень вертикальних відліків даних, отриманих окремими сейсмоприймачами, та кілька десятків відбиваючих горизонтів, виділених кваліфікованим експертом-інтерпретатором [12]. Лінійні

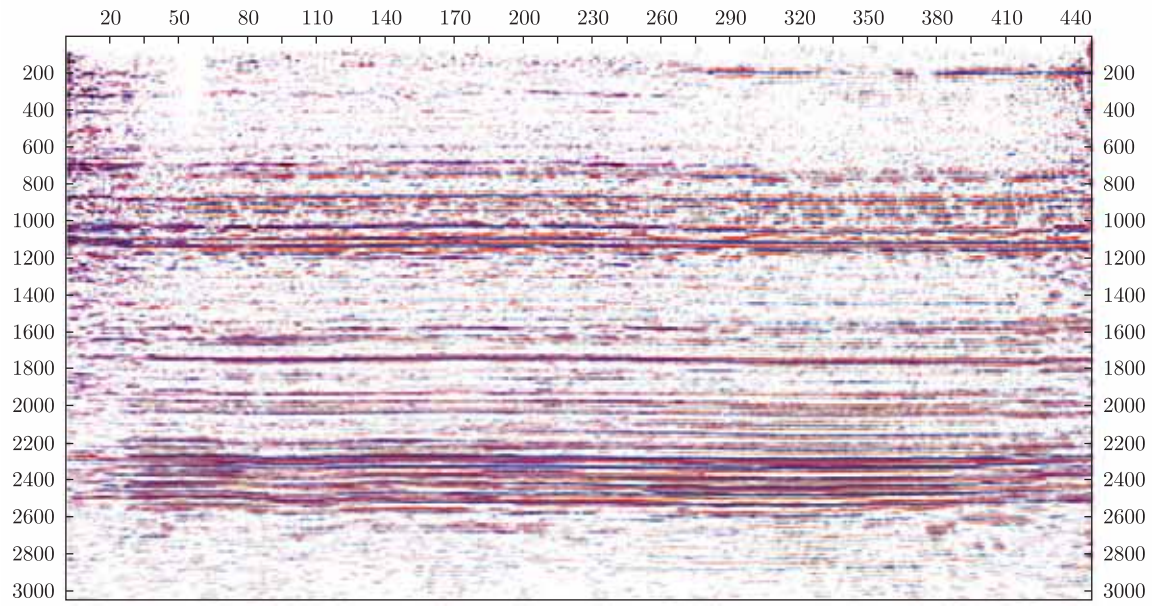


Рис. 1. Типова сейсмограма геологічного профілю

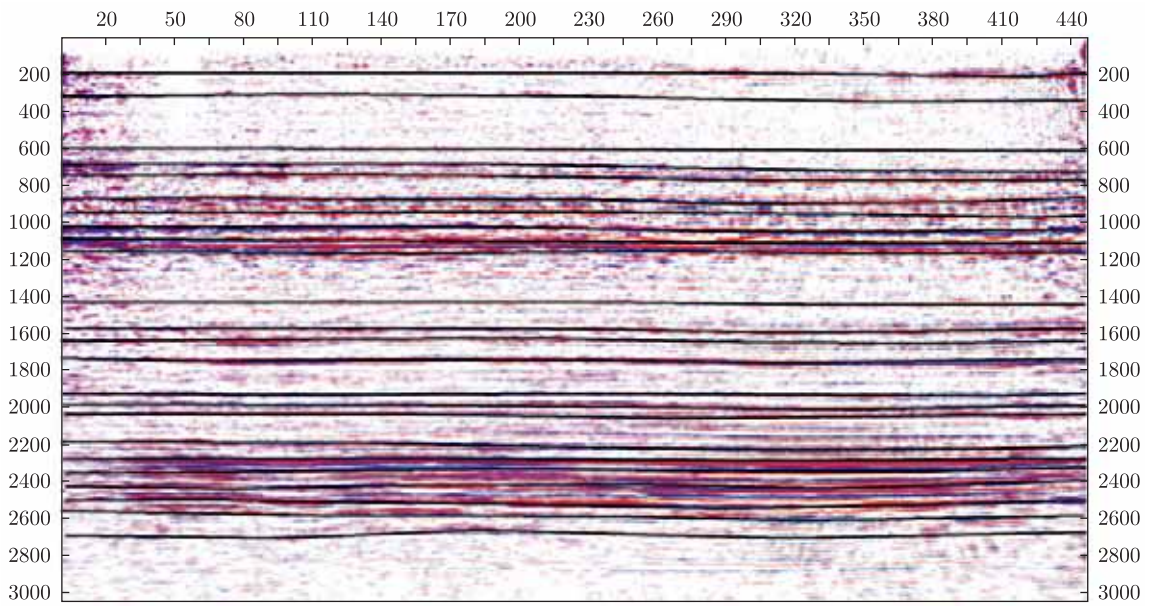


Рис. 2. Виділення відбиваючих горизонтів на сейсмограмі

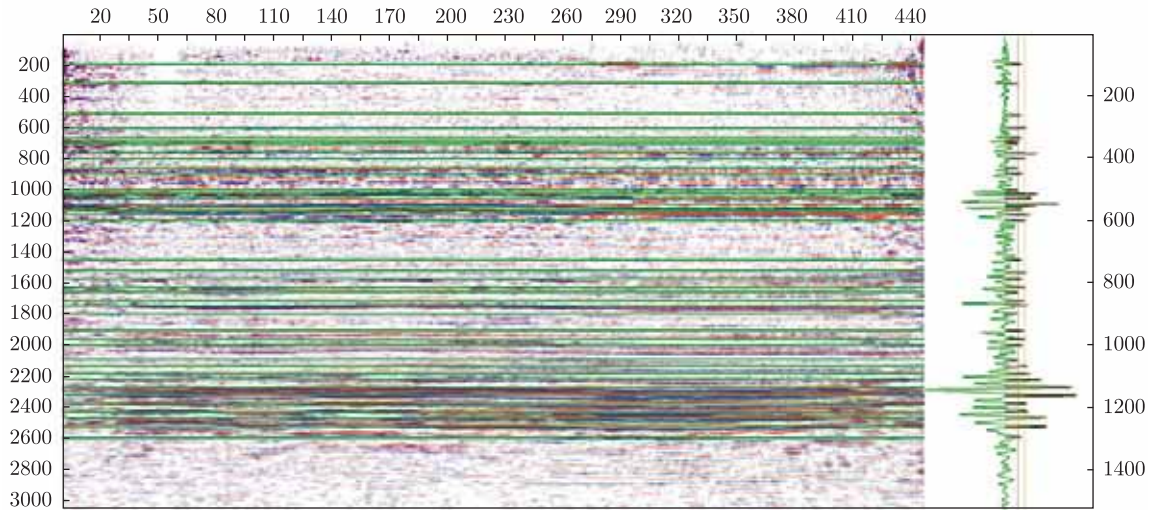


Рис. 3. Застосування дискретного перетворення Радона до типової сейсмограми

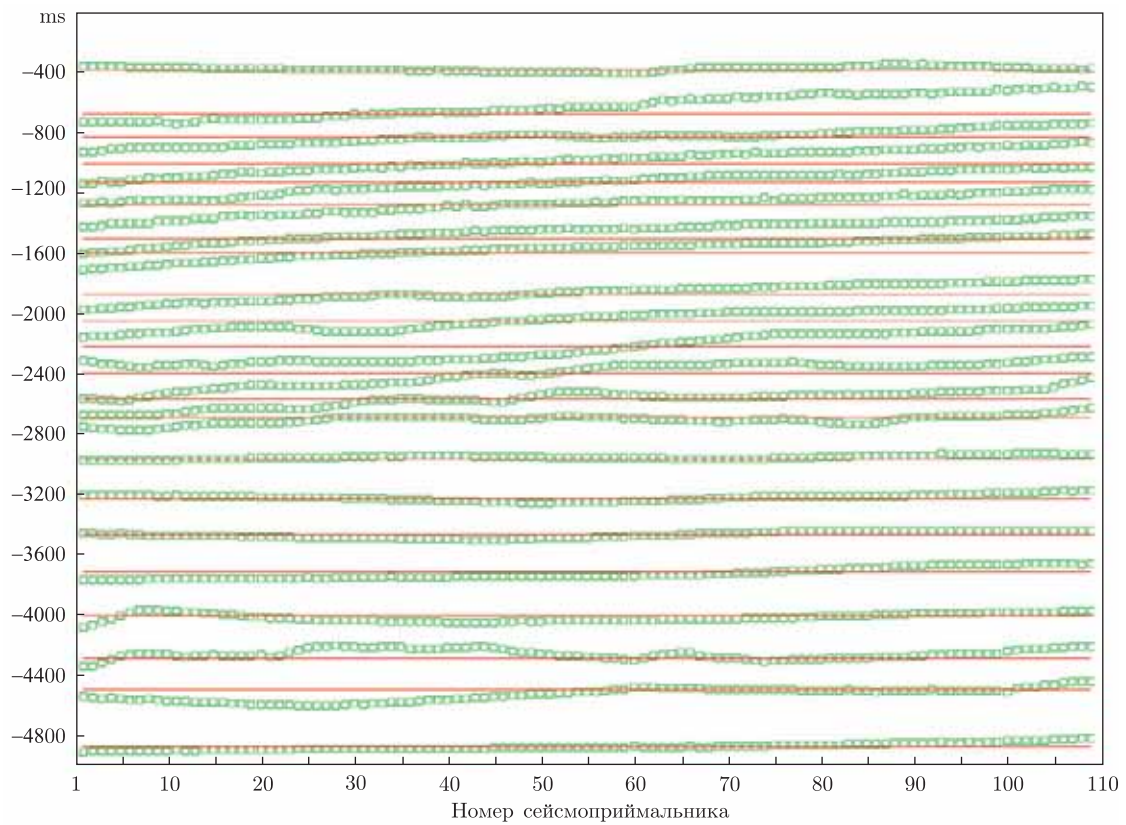


Рис. 4. Зіставлення автоматично виділених лінійних відбиваючих горизонтів з експертно визначеними

відбиваючі горизонти також виділялися автоматично з використанням розробленого алгоритму. Приклад накладення автоматично виділених горизонтів (червона лінія) на визначені експертом (зелені клітинки) демонструє рис. 4.

Якість автоматичного виділення оцінювалася коефіцієнтом детермінації R^2 [13] і достовірністю підгонки α за критерієм Фішера [14]. Середній на всіх 24 сейсмограмах коефіцієнт детермінації становив $R^2 = 0,997$ при вірогідності $\alpha = 0,861$, що є досить прийнятним результатом.

Таким чином, запропонований алгоритм на основі одновимірного ДПР забезпечує ефективне і достовірне автоматичне виділення лінійних осей синфазності на сейсмограмах, що дає змогу істотно спростити і прискорити процес їх обробки, звільнити оператора від виконання рутинних операцій та зосередити його зусилля на змістовній інтерпретації.

1. Гурвич И. И., Боганик Г. Н. Сейсмическая разведка. – Москва: Недра, 1980. – 552 с.
2. Семенова С. Г., Ковалев Д. М., Семенец О. И. Возможности прогноза фазового состояния углеводородов в залежах по сейсмическим данным // Теоретичні та прикладні аспекти геоінформатики. – Київ: ЦММ ІГН НАН України, 2009. – С. 177–185.
3. Бескровный В. В., Надточий В. И., Бескровная И. А. Выделение отрезков прямых на цифровых снимках на основе биоалгоритмов обработки зрительной информации // Пробл. информ. та управління. – 2009. – Вып. 4(28). – С. 16–19. – [36].
4. Федотов Н. Г. Методы стохастической геометрии в распознавании образов. – Москва: Радио и связь, 1990. – 144 с.
5. Волегов Д. Б., Гусев В. В., Юрин Д. В. Обнаружение прямых линий на изображениях на основе преобразования Хартли. Быстрое преобразование Хафа // Proc. Sixteen. Int. Conf. on Computer Graphics and Applications (GraphiCon'2006). – Novosibirsk: Ins. Comp. Mathemat. and Mathemat. Geoph., 2006. – P. 235–242.
6. Хелгасон С. Преобразование Радона / Пер. с англ. – Москва: Мир, 1982. – 152 с.
7. Баранов В. Г., Храмов А. Г. Дискретное вверное преобразование Радона в задаче выделения центров ветвей сетчатых структур // Компьютерная оптика. Вып. 23. – Самара: Ин-т систем обработки изображений РАН, 2002. – С. 44–47.
8. Пат. РФ на изобрет. № 2300123 С2, МПК⁷ G01VK 1/28. Высокоразрешающее преобразование Радона для обработки сейсмических данных / Я. Мур, К. Костов, Д. Ингст; № 2004137818/28; Заяв. 19.05.2003; Опубл. 27.05.2007; Бюл. № 15.
9. Шальмов Д. С. Алгоритмы устойчивой кластеризации на основе индексных функций и функций устойчивости // Стохастическая оптимизация в информатике / Под ред. О. Н. Граничина. – Санкт-Петербург: Изд-во СПбГУ, 2008. – Вып. 4. – С. 236–248.
10. Haykin S., Kesler S. Prediction-error filtering and maximum-entropy spectral estimation // Nonlinear Methods of Spectral Analysis / Ed. by S. Haykin. – Berlin: Springer, 1983. – P. 9–72.
11. Shi J., Malik J. Normalized cuts and image segmentation // IEEE Trans. on Patt. Anal. and Mach. Intellig. – 2000. – 22, No 8. – P. 888–905.
12. Бондарев В. И., Крылатков С. М. Основы обработки и интерпретации данных сейсморазведки. – Екатеринбург: УГГГА, 2001. – 194 с.
13. Дрейпер Н. Р., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ / Пер. с англ. – Москва: Диалектика, 2007. – 912 с.
14. Rayner J. C. W., Best D. J. Smooth tests of goodness of fit. – Oxford: Oxford Univ. Press, 1989. – 176 p.

С. А. Станкевич, О. В. Титаренко

Выделение осей синфазности на сейсмограммах при помощи одномерного преобразования Радона

Предложен алгоритм автоматического выделения линейных осей синфазности на сейсмограммах на основе одномерного дискретного преобразования Радона и плоской агломеративной кластеризации. Алгоритм обеспечивает достоверность, приемлемую для сейсморазведки. Использование разработанного алгоритма позволит усовершенствовать автоматизированную обработку данных сейсморазведки и повысить объективность их интерпретации.

S. A. Stankevich, O. V. Titarenko

Separation of the coherence axes on seismograms using the one-dimensional Radon transform

An algorithm for the linear pattern automatic detection on seismograms based on the one-dimensional discrete Radon transform and the flat agglomerative clustering is proposed. The algorithm provides a confidence level acceptable to the seismic exploration. The use of the developed algorithm will improve the automated processing of seismic survey data and enhance the objectivity of their interpretation.



УДК 541.18.045

В. В. Коновалова, С. В. Горобець, Є. А. Полоз, А. Ф. Бурбан

Магнітно-активні ультрафільтраційні мембрани на основі целюлози

(Представлено академіком НАН України М. Т. Картелем)

Розроблено ультрафільтраційні магнітно-активні мембрани з метою зменшення ефекту концентраційної поляризації. Для цього поверхня промислових целюлозних мембран була активована для прищеплення полімерного спейсера з подальшою іммобілізацією наночастинок магнетиту Fe_3O_4 . Рух наночастинок магнетиту, закріплених на полімерному ланцюзі в змінному магнітному полі, викликає турбулізацію розчинника в дифузійному шарі, що приводить до збільшення коефіцієнта масопереносу через мембрану.

Мембранні технології в сучасному світі відіграють значну роль як у розв'язанні локальних галузевих питань, так і глобальних проблем, що постали перед людством, зокрема забезпечення населення якісними продуктами харчування, питною водою та сучасними джерелами енергії. Тому розроблення нових синтетичних мембран, що використовуються в баромембранних процесах зворотного осмосу, нано-, ультра- та мікрофільтрації, є актуальним завданням науковців. Концентраційна поляризація, що виникає під час роботи мембрани, — основний недолік мембранних процесів [1–4], явище якої відзначається в різкому підвищенні концентрації розчиненої речовини в примембранному шарі. Причина зниження рушійної сили процесу і падіння продуктивності полягає в примусовому перенесенні розчинника через мембрану. В процесі фільтрування розчини полімерів (у випадку перевищення точки гелеутворення) або колоїдні розчини (у разі добутку розчинності) утворюють шар гелю на поверхні мембрани, що зумовлює збільшення гідравлічного опору системи, формування шару осаду та може призвести до забруднення мембрани та її часткового руйнування.

Можливий шлях зниження концентраційної поляризації — це контрольоване модифікування поверхні мембрани [2–6]. Так, численними дослідженнями доведено, що гідрофілізація поверхні та створення заряджених мембран спричинює значне зниження їх забрудненості [3–5 та ін.]. Новим підходом у модифікуванні поверхні мембран є створення чутливих або сенсорних мембран, а саме: рН або термочутливих, що змінюють свої характеристики та властивості поверхні при зміні зовнішніх стимулів, таких як рН і температура [6–8]. А отже, проблема зниження впливу концентраційної поляризації і дотепер є актуальною.

© В. В. Коновалова, С. В. Горобець, Є. А. Полоз, А. Ф. Бурбан, 2014

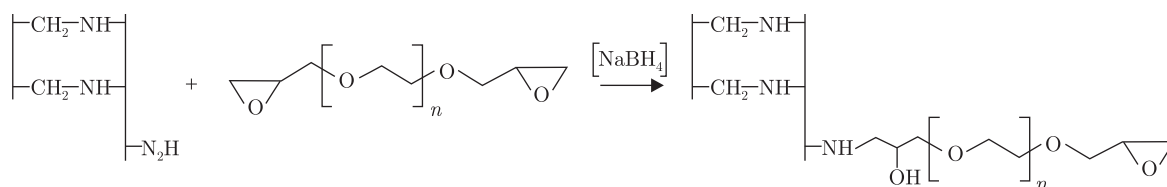
У даному повідомленні представлений радикально новий підхід до зниження концентраційної поляризації [9]. Мембрану модифікують шляхом прищеплення до поверхні мембрани полімерного спейсера та іммобілізації на ньому наночастинок магнетиту (Fe_3O_4). Очікується, що в наномасштабі рух наночастинок на полімерному ланцюзі в магнітному полі може привести до збільшення інтенсивності перемішування в примембранному шарі і відповідно до зменшення концентраційної поляризації.

В роботі використовували промислові целюлозні мембрани C030 ("Microdyn Nadir", Німеччина) з ММ 30000.

Модифікування мембран проводили в два етапи.

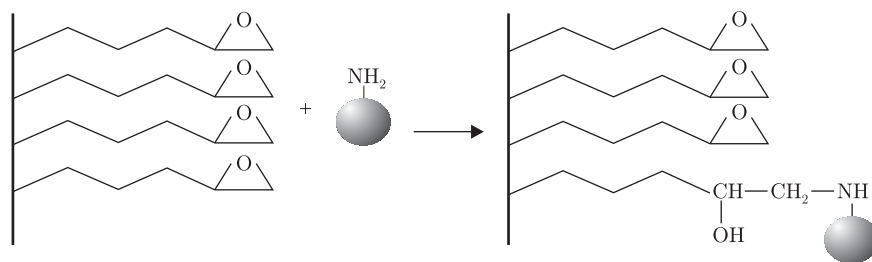
1 етап — функціоналізація поверхні мембран. Для утворення на поверхні мембран реакційних альдегідних груп їх окиснювали 0,1 моль/л NaIO_4 при $50\text{ }^\circ\text{C}$ 1 год. Після промивання дистильованою водою активовані мембрани витримували в 0,6%-му водному розчині поліетиленіміну (ПЕІ) впродовж 1 год. Аміногрупи ПЕІ утворюють з альдегідними групами мембрани основи Шиффа. Для відновлення основ Шиффа мембрани витримували в 0,1 моль/л NaBH_4 впродовж 30 хв.

2 етап — іммобілізація магнетиту. Прищеплення наночастинок магнетиту було проведено через проміжну стадію модифікації — іммобілізація проміжного спейсера — поліетилендигліцидилетеру (ПЕДГЕ), що з'єднує аміногрупи на поверхні мембрани (схема 1) та аміногрупи функціоналізованих наночастинок:

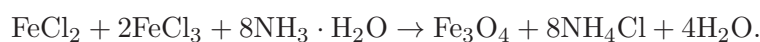


Модифіковані мембрани витримували в 0,1%-му ПЕДГЕ при $50\text{ }^\circ\text{C}$ впродовж 1 год з додаванням невеликої кількості відновника — NaBH_4 для збереження реакційно активних вільних гліцидильних груп [10].

Мембрани з прищепленим ПЕДГЕ поміщали в розчин функціоналізованих наночастинок магнетиту (схема 2) та витримували 20 год при кімнатній температурі:



Синтез наночастинок магнетиту. Для синтезу магнітних наночастинок використовували методику, описану в статті [11], згідно з якою солі Fe^{2+} , Fe^{3+} розчиняли в дистильованій воді у співвідношенні 2 : 1 відповідно. Суміш солей поміщали в 25%-й розчин аміаку до утворення зелено-чорної суміші та осаджували в магнітному полі. Стабілізатором слугувала перхлорна кислота.



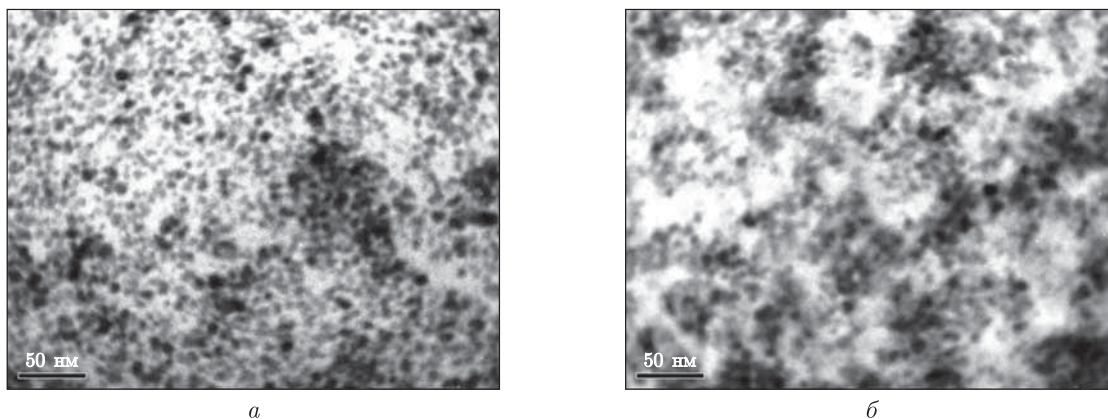


Рис. 1. TEM наночастинок Fe_3O_4 немодифікованих (а) та функціоналізованих ПЕІ (б)

Функціоналізація наночастинок магнетиту. Для іммобілізації на поверхні магнетиту функціональних аміногруп використовували ПЕІ з ММ 25000 (“Sigma”). До попередньо стабілізованих наночастинок магнетиту додавали 1%-й водний розчин ПЕІ у співвідношенні 4 : 3 та інтенсивно перемішували впродовж 30 хв.

Розмір синтезованих та функціоналізованих наночастинок магнетиту контролювали за допомогою трансмісійної мікроскопії. TEM фотографії отримували на електронному мікроскопі “JEOL JEM 1230”, прискорююча напруга 100 кВ.

Характеристика мембран. СЕМ мікроскопію використовували для підтвердження іммобілізації на поверхні мембран наночастинок магнетиту. Зображення були отримані на електронному мікроскопі “JSM 6700F”. На інкулюдовані зразки мембран наносили вуглецеве напилення.

Характеристики роздільних мембран вивчали на стандартній циліндричній комірці непроточного типу Amicon 8050 (“Millipore”, США). Внутрішній об’єм комірки становив 50 мл, площа робочої поверхні мембрани — $13,4 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2$. Для зниження впливу концентраційної поляризації комірці була обладнана магнітною мішалкою. Швидкість обертання мішалки дорівнювала (250 ± 10) об/хв. Ультрафільтрацію поліетиленгліколю (ПЕГ) з ММ 35000 (“Fluka”) проводили при (293 ± 2) К. Робочий тиск у комірці задавали за допомогою стисненого азоту та змінювали від 50 до 400 кПа, а концентрацію ПЕГ — від 0,1 до 0,6 %.

Ультрафільтраційна комірці розміщена між двома сталевими соленоїдами (1 А), підключеними до змінного струму 24 В та частотою 50 Гц. Соленоїди розташовані на двох протилежних сторонах комірки на відстані 7 см, таким чином напрям магнітного поля був паралельний селективному шару мембрани. Частоту та інтенсивність магнітного поля не змінювали.

Результати та їх обговорення. Отримана суспензія стабілізованих наночастинок магнетиту має чорно-коричневе забарвлення, проявляє видимі магнітні властивості в присутності постійного магніту. Суспензія є стабільною не менше шести місяців. Розміри синтезованих частинок визначали за допомогою трансмісійної мікроскопії. Досліджувані наночастинки магнетиту є монодисперсними та мають розмір 10–12 нм (а на рис. 1). Після додавання до суспензії ПЕІ з метою функціоналізації поверхні наночастинок аміногрупами видимого коагулювання не спостерігалось. Функціоналізовані ПЕІ наночастинки Fe_3O_4 зберігають свої розміри в діапазоні від 10 до 12 нм, а також не утворюють видимих агрегатів (див. б на рис. 1).

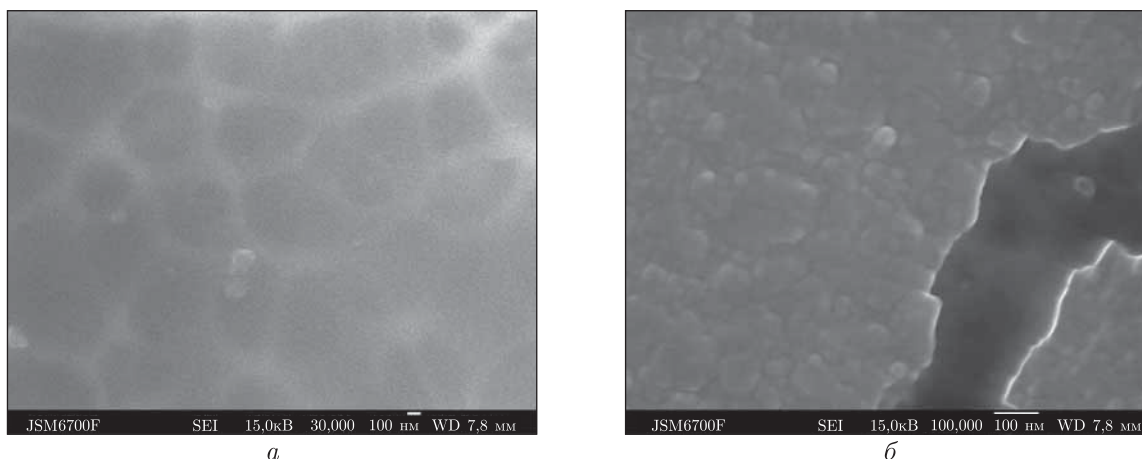


Рис. 2. СЕМ немодифікованої (а) та модифікованої (б) наночастинками Fe_3O_4 целюлозної мембрани

Для підтвердження іммобілізації наночастинок магнетиту на поверхні мембрани була проведена сканувальна електронна мікроскопія модифікованих та немодифікованих мембран. Електронні фотографії (рис. 2) поверхні вказаних мембран дуже різняться. Поверхня модифікованої мембрани вкрита шаром наночастинок гексагональної структури, притаманної оксиду заліза. На жаль, не можна точно сказати, що наночастинок розташовані окремо та однорідно вкривають поверхню мембрани. Однак потрібно зважати на те, що електронне зображення може дещо відрізнятися від дійсності в результаті багатостадійної підготовки досліджуваних зразків.

Ультрафільтрація ПЕГ. Зазвичай при ультрафільтрації потік розчинника через мембрану прямо пропорційний прикладеному гідростатичному тиску. Однак у випадку розчину ситуація змінюється: при підвищенні тиску потік спочатку збільшується, а при досягненні певного тиску продуктивність із ростом руйнівної сили не змінюється. Найбільший потік, що досягається за таких умов, називають максимальним потоком J_∞ . Згідно з рівнянням концентраційної поляризації, його величина прямо пропорційна логарифму концентрації розчиненої речовини:

$$J_\infty = k \ln \left(\frac{C_m}{C_b} \right) = k \ln C_m - k \ln C_b, \quad (1)$$

де k — коефіцієнт масопереносу; C_m — концентрація розчиненої речовини у примембранному шарі; C_b — концентрація вихідного розчину.

Першим етапом модифікування мембран було прищеплення полімерного спейсера ПЕІ для подальшого закріплення наночастинок. Транспортні властивості мембран з прищепленим ПЕІ досліджували в процесі ультрафільтрації ПЕГ з ММ 35000.

Залежність об'ємного потоку ПЕГ від прикладеного робочого тиску при різних концентраціях розчиненої речовини демонструє рис. 3. Як видно з наведених залежностей, об'ємний потік зростає зі збільшенням прикладеного тиску. При тисках понад 200 кПа об'ємний потік виходить на плато, що свідчить про утворення гелевого шару на поверхні мембрани за рахунок концентраційної поляризації. Зі збільшенням концентрації ПЕГ величина граничного об'ємного потоку зменшувалася.

При нанесенні на поверхню мембрани магнітно-активних наночастинок криві залежності об'ємного потоку від прикладеного тиску дещо змінюються (див. б на рис. 3). Так, при

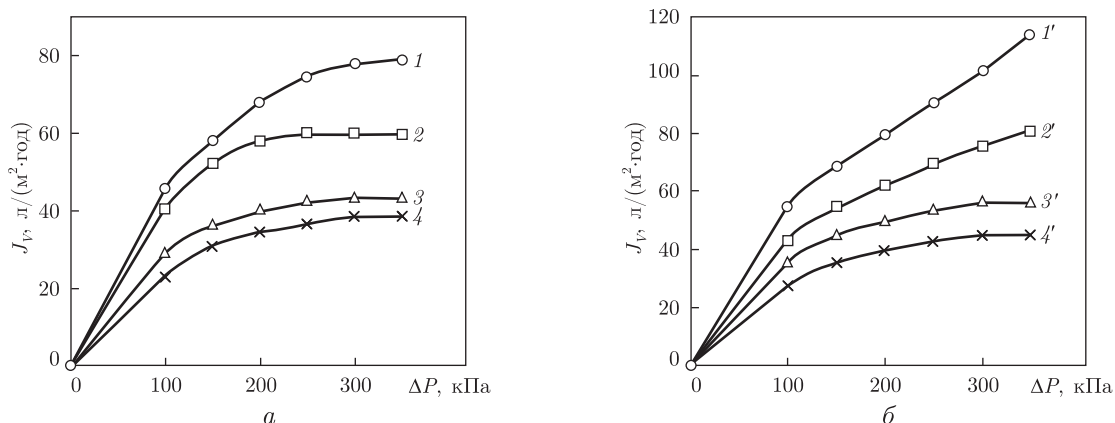


Рис. 3. Криві залежності об'ємного потоку (J_V) від прикладеного тиску (ΔP) для модифікованої мембрани з шаром ПЕГ без наночастинок магнетиту (а) та з наночастинками в постійному магнітному полі (б). Криві: 1, 1' – 0,1%; 2, 2' – 0,2%; 3, 3' – 0,4%; 4, 4' – 0,6%

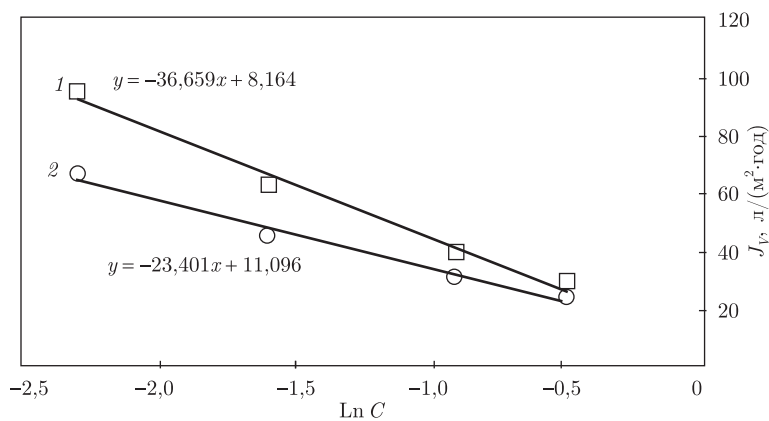


Рис. 4. Залежність максимального об'ємного потоку від логарифму концентрації ПЕГ для мембрани з магнітно-активними наночастинками у змінному (1) та постійному (2) магнітному полі

масовій концентрації ПЕГ 0,1% значення граничного об'ємного потоку при збільшенні тиску до 400 кПа не досягалося. Об'ємний потік при цьому збільшувався від 80 до 121 л/(м²· год) (на 50%) у порівнянні з мембраною без магнетиту. Подібна залежність спостерігалася і для концентрації 0,2%, а отже, за цих умов концентраційна поляризація на мембрані також не досягалася. Граничні значення об'ємного потоку досягались для концентрації 0,4 й 0,6% при тисках понад 300 кПа. Таким чином, модифікування поверхні мембрани магнітно-активними частинками значно покращує її транспортні характеристики навіть за умов постійного магнітного поля, що задається магнітною мішалкою. Ймовірно, такий ефект пояснюється рухом постійного магнітного поля, що спричинює рух наночастинок магнетиту в дифузійному шарі.

Для дослідження впливу змінного та постійного магнітного поля на транспортні властивості мембран з іммобілізованими наночастинками магнетиту ми визначали коефіцієнт масопереносу через мембрану κ .

При прикладенні зовнішнього змінного магнітного поля коефіцієнт масопереносу збільшувався в 1,6 раза. Коефіцієнт масопереносу є відношенням коефіцієнта дифузії до товщи-

ни примембранного шару. Оскільки ультрафільтрацію ПЕГ проводили при однакових концентраціях, коефіцієнт дифузії не змінювався. Отже, зростання коефіцієнта масопереносу визначається зменшенням товщини примембранного шару, яка в свою чергу залежить від інтенсивності турбулізації потоку над мембраною. Змінне та постійне магнітне поле викликає більш інтенсивний рух наночастинок магнетиту в примембранному шарі, що зумовлює значне зростання коефіцієнта масопереносу та зниження ефекту концентраційної поляризації.

Таким чином, з метою зменшення ефекту концентраційної поляризації було розроблено ультрафільтраційні магнітно-активні мембрани. Для цього поверхня промислових целюлозних мембран була активована для прищеплення полімерного спейсера та подальшою іммобілізацією наночастинок магнетиту Fe_3O_4 . Рух наночастинок магнетиту, закріплених на полімерному ланцюзі в змінному магнітному полі, викликає турбулізацію розчинника в дифузійному шарі, що зумовлює збільшення коефіцієнта масопереносу через мембрану.

1. Baker R. W. Membrane technology and applications. – Chichester: Wiley, 2004. – 545 p.
2. Wagner E. M., Sagle A. C., Sharmab M. M. Surface modification of commercial polyamide desalination membranes using poly(ethylene glycol) diglycidyl ether to enhance membrane fouling resistance // J. Membrane Sci. – 2011. – **367**. – P. 273–287.
3. Louie J. S., Pinnau I., Ciobanu I. et al. Effects of polyether-polyamide block copolymer coating on performance and fouling of reverse osmosis membranes // Ibid. – 2006. – **280**. – P. 762–770.
4. Li Q., Bi Q., Lin H. et al. A novel ultrafiltration (UF) membrane with controllable selectivity for protein separation // Ibid. – 2013. – **427**. – P. 155–167.
5. Босак В. З., Вакулук П. В., Бурбан А. Ф. та ін. Отримання заряджених полісульфонових ультрафільтраційних мембран та вивчення їх властивостей // Доп. НАН України. – 2007. – № 2. – С. 127–132.
6. Khayeta M., Abu Semanb M. N., Hilal N. Response surface modeling and optimization of composite nanofiltration modified membranes // J. Membrane Sci. – 2010. – **349**. – P. 113–122.
7. Zhao X., Su Y., Chen W. et al. pH-responsive and fouling-release properties of PES ultrafiltration membranes modified by multi-functional block-like copolymers // Ibid. – 2001. – **382**. – P. 222–230.
8. Побігай Г. А., Коновалова В. В., Самченко Ю. М. та ін. Термочутливі полімерні мембрани // Наук. зап. НАУКМА. – 2012. – **131**. – С. 12–18.
9. Himstedt H., Yang Q., Prasad Dasi L. et al. Magnetically activated micromixers for separation membranes // Langmuir. – 2011. – **27**. – P. 5574–5581.
10. Huang D., Peng Z., Hu Z. A new consolidation system for aged silk fabrics: Effect of reactive epoxide-ethylene glycol diglycidyl ether // React. & Funct. Polym. – 2013. – **73**. – P. 168–174.
11. Massart R. Preparation of aqueous magnetic liquids in alkaline and acidic media // IEEE Transact. Magnet. – 1981. – **17**, No 2. – P. 1247–1248.

Національний університет “Кієво-Могилянська академія”
НТУ України “Київський політехнічний інститут”

Надійшло до редакції 18.10.2013

В. В. Коновалова, С. В. Горобец, Е. А. Полоз, А. Ф. Бурбан

Магнітно-активні ультрафільтраційні мембрани на основі целюлози

Разработаны ультрафильтрационные магнитно-активные мембраны с целью уменьшения эффекта концентрационной поляризации. Для этого поверхность промышленных целлюлозных мембран была активирована для прививки полимерного спейсера с дальнейшей иммобилизацией наночастиц магнетита Fe_3O_4 . Подвижность наночастиц магнетита, привитых к полимерной цепочке в переменном магнитном поле, вызывает турбулизацию растворителя в диффузионном шаре, что и приводит к увеличению коэффициента массопереноса через мембрану.

V. V. Konovalova, S. V. Gorobets, E. A. Poloz, A. F. Burban

Magnetically active ultrafiltration membranes based on cellulose

Magnetically active ultrafiltration membranes are developed to reduce the concentration polarization effect. For this purpose, the surface of industrial cellulose membranes are activated for the polymer spacer grafting and the following immobilization of Fe_3O_4 nanoparticles. Movement of magnetite nanoparticles attached to the polymer chain in an alternating magnetic field causes the turbulence of a solvent in the diffusion layer, which leads to an increase of the mass transfer coefficient through a membrane.

В. С. Кублановский, В. Н. Никитенко, К. П. Руденко

Энергия реорганизации при разряде гидроксиэтилиминодиацетатных комплексов палладия (II)

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

Рассчитаны полная энергия реорганизации системы и ее составляющие — энергии реорганизации растворителя и перестройки внутренней координационной сферы реагирующего комплексного иона при восстановлении гидроксиэтилиминодиацетатных комплексов палладия (II). Вычисленные значения энергии реорганизации растворителя и энергии реорганизации внутренней координационной сферы комплексного иона $[\text{Pd}(\text{heida})_2]^{2-}$ находятся в согласии с теорией Маркуса и Догонадзе–Кузнецова. Предложен экспериментальный метод анализа вольтамперных зависимостей в “маркусовских” координациях, позволяющий оценить полную энергию реорганизации при восстановлении координационных ионов. Установлена зависимость полной энергии реорганизации системы от температуры гидроксиэтилиминодиацетатного электролита. Полученные экспериментальные данные хорошо совпадают с расчетными.

Энергия реорганизации системы и энергия активации реакции перехода являются фундаментальными характеристиками электродного процесса.

Известно, что энергия активации электрохимического процесса пропорциональна общему перенапряжению ΔE соответствующей электрохимической реакции и вычисляется разностью энергий исходного и конечного состояний исследуемой системы. Энергия реорганизации системы определяется природой растворителя, радиусом реагирующей частицы, изменением ее заряда, константой устойчивости комплексного иона и температурой раствора.

Поэтому исследование энергетических характеристик электрохимического процесса, их связи с кинетическими стадиями представляет на современном этапе значительный научный интерес, поскольку расширяет познания об элементарном акте переноса электрона и позволяет управлять электродным процессом.

К энергетическим параметрам электрохимического процесса следует отнести: полную энергию реорганизации системы, энергию реорганизации растворителя и энергию перестройки внутренней координационной сферы реагирующего комплексного иона, энергию активации процесса, а также отдельных его стадий, ее зависимость от потенциала и перенапряжения. При этом надо различать безбарьерный, классический (замедленный разряд, смешанную и диффузионную кинетику) и безактивационный разряды. Однако данные фундаментальные характеристики электрохимического процесса до сих пор не всегда можно определить экспериментально.

Теоретическая часть. Электродные процессы относятся к гетерогенным химическим реакциям, протекающим на границе раздела фаз электрод — электролит и сопровождающимися переносом заряда через эту границу.

В современных теориях переноса электрона основную роль в формировании Франк–Кондоновского барьера играет полная энергия реорганизации системы λ_{Π} , состоящая из суммы энергии реорганизации растворителя $\lambda_{\text{р}}$ и энергии реорганизации внутренней координационной сферы реагирующего комплексного иона $\lambda_{\text{к}}$:

$$\lambda_{\Pi} = \lambda_{\text{р}} + \lambda_{\text{к}}. \quad (1)$$

При гетерогенном восстановлении ионов происходит переполяризация растворителя и перестройка параметров внутренней сферы разряжающегося координационного иона, т. е. электрохимически активного комплекса (ЭАК). Основным моментом теории реорганизации растворителя является рассмотрение квантово-механического переноса электрона через границу металл – раствор в рамках адиабатического приближения Борна–Оппенгеймера [1]. В теории реорганизации растворителя определяющая роль отводится распределению диполей растворителя вблизи реагирующих частиц.

В данном сообщении предлагается полуэмпирический метод расчета полной энергии реорганизации системы, а также получения информации об энергии реорганизации растворителя и энергии перестройки внутренней координационной сферы электрохимически активного комплексного иона, исходя из механизма разряда палладия (II) из гидроксэтилиминодиацетатного электролита и установленного состава ЭАК [2].

Полная энергия λ_{Π} связана с энергией активации реакции перехода уравнением Маркуса [3, 4]:

$$A_0^{wa} = \frac{(\lambda_{\Pi} + \Delta U)^2}{4\lambda_{\Pi}}, \quad (2)$$

где A_0^{wa} — энергия активации отдельного элементарного акта, т. е. реакции перехода; ΔU — тепловой эффект электрохимической реакции, причем $|\Delta U| \leq \lambda_{\Pi}$.

В качестве объекта исследования выбраны гидроксэтилиминодиацетатные комплексы палладия (II), поскольку они представляют не только научный, но и практический интерес [5].

Цель работы заключалась в определении полной энергии реорганизации системы и ее составляющих — энергии реорганизации растворителя и перестройки внутренней координационной сферы ЭАК при восстановлении палладия (II) из гидроксэтилиминодиацетатного электролита.

Методика эксперимента. Гидроксэтилиминодиацетатные комплексы палладия (II) синтезировали из хлорида палладия (II), используя методику, описанную в статье [6]. Состав исследуемого электролита: $5,00 \cdot 10^{-4}$ моль \cdot л $^{-1}$ [Pdheida]; $5,00 \cdot 10^{-2}$ моль \cdot л $^{-1}$ H₂heida; $1,0$ моль \cdot л $^{-1}$ NaClO₄; рН 2,0.

Методика вольтамперных измерений подробно описана в статье [6]. Эксперименты проводили в электрохимической ячейке ЯСЭ-2 в атмосфере аргона в интервале температур $(22-60) \pm 0,1$ °С.

Рабочий электрод представлял собой торец платиновой проволоки диаметром 1 мм, на который предварительно перед каждым опытом наносили слой палладия из хлоридно-аммонийного электролита [7] при плотности тока $5 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ в течение 20 мин. В качестве вспомогательного электрода использовали запаянную в стекло платиновую проволоку. Значения потенциалов приведены относительно хлоридсеребряного электрода сравнения.

Обсуждение результатов. Для расчета полной энергии реорганизации системы, как следует из уравнения (2), необходимо знать значения энергии активации реакции перехода

и теплового эффекта реакции. Величина $A_0^{wa} = 63,4 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$ при восстановлении гидроксидэтилиминодиацетатных комплексов палладия (II) определена нами экспериментально из зависимости логарифмов токов обмена от обратной температуры [8, 9]. Величину ΔU определяли, исходя из законов термодинамики и принципа Томсона.

На основании законов термодинамики изменение свободной энергии процесса ΔF_ν , согласно уравнению Гиббса–Гельмгольца [10], равно:

$$\Delta F_\nu = -\Delta U_\nu + T \left(\frac{\partial \Delta F}{\partial T} \right)_\nu, \quad (3)$$

где $(\partial \Delta F / \partial T)_\nu$ — термодинамический коэффициент при постоянном объеме.

Применительно к электрохимическим процессам, используя принцип Томсона, имеем:

$$\Delta F_\nu = -nFE_0, \quad (4)$$

где E_0 — стандартный потенциал палладиевого электрода в исследуемой системе. Отсюда можно показать, что тепловой эффект реакции, согласно уравнениям (3) и (4), равен:

$$\Delta U_\nu = nFE_0 + nFT \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_\nu. \quad (5)$$

Учитывая уравнение для равновесного потенциала

$$E = E_0 + \frac{RT}{nF} \ln[\text{Pd}]^{2+}, \quad (6)$$

получим для теплового эффекта реакции следующее выражение:

$$\Delta U_\nu = nF \left(E - \frac{RT}{nF} \ln[\text{Pd}]^{2+} \right) + nFT \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_\nu. \quad (7)$$

Равновесный потенциал палладиевого электрода в исследуемой системе (относительно стандартного водородного электрода) при pH 2,0 равен $-0,107 \text{ В}$; изменение E с температурой незначительно ($dE/dT = -1,86 \cdot 10^{-3} \text{ В/град}$). Вычисленное по уравнению (7) значение ΔU_ν при восстановлении палладия (II) из гидроксидэтилиминодиацетатного электролита при pH 2,0 равно $-1,9 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$.

Подставив в уравнение (2) экспериментально полученные значения энергии активации реакции перехода и теплового эффекта реакции, находим, что полная энергия реорганизации системы при восстановлении палладия (II) из гидроксидэтилиминодиацетатного электролита при pH 2,0 составляет $257,4 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$.

Электрохимически активной формой ионов, которые принимают непосредственное участие в реакции перехода при восстановлении палладия (II) из гидроксидэтилиминодиацетатного электролита при pH 2,0 являются комплексы $[\text{Pd}(\text{heida})_2]^{2-}$, разряд которых проходит через стадию адсорбции [2, 11] и лимитируется смешанной кинетикой.

Исходя из механизма электродного процесса и состава ЭАК, можно приближенно считать, что энергия реорганизации комплексного иона при восстановлении палладия (II) из гидроксидэтилиминодиацетатного электролита (pH 2,0) приблизительно равна свободной энергии (изменению изобарного потенциала) реакции диссоциации комплекса $[\text{Pd}(\text{heida})_2]^{2-}$ ($pK_2 = 23,7$) [12]. Вычисленное значение энергии реорганизации внутренней координационной сферы $\lambda_k = 133,9 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$.

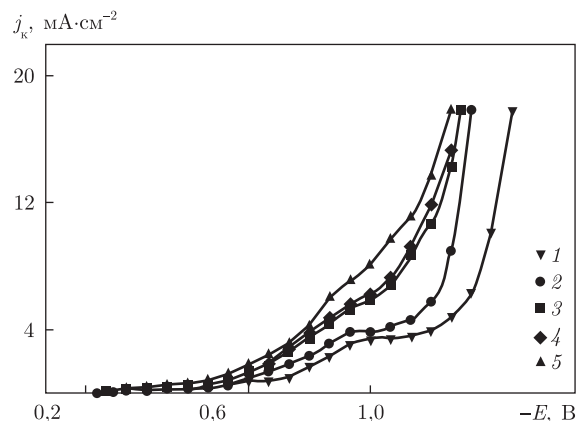


Рис. 1. Поляризационные кривые восстановления палладия (II) из гидроксиэтилиминодиацетатного электролита, содержащего $5,00 \cdot 10^{-4}$ моль \cdot л $^{-1}$ [Pdheida]; $5,00 \cdot 10^{-2}$ моль \cdot л $^{-1}$ H₂heida; 1,0 моль \cdot л $^{-1}$ NaClO₄, при pH 2,0, скорости развертки потенциала 0,001 В \cdot с $^{-1}$ и температуре, °С: 22 (1), 30 (2), 40 (3), 50 (4), 60 (5)

Исходя из уравнения (1), энергия λ_p в гидроксиэтилиминодиацетатном электролите при pH 2,0 составляет 123,5 кДж \cdot моль $^{-1}$.

Согласно теории Догонадзе–Кузнецова [1], энергия реорганизации системы больше теплового эффекта реакции, т. е. $|\lambda_{\Pi} \geq \Delta U|$. Следовательно, энергия активации реакции перехода определяется в основном взаимодействием реагентов с растворителем и перестройкой реагирующего комплекса. Энергия λ_p лежит в пределах 50–150 кДж \cdot моль $^{-1}$, а энергия реорганизации внутренней координационной сферы разряжающегося иона λ_k — в пределах 10–200 кДж \cdot моль $^{-1}$.

Вычисленные значения энергии реорганизации растворителя 123,5 кДж \cdot моль $^{-1}$ и энергии реорганизации внутренней координационной сферы реагирующего комплекса $[\text{Pd}(\text{heida})_2]^{2-}$ 133,9 кДж \cdot моль $^{-1}$ находятся в согласии с теорией Маркуса и Догонадзе–Кузнецова [1].

Значительный интерес представляет экспериментальное определение величины полной энергии реорганизации системы из электрохимических данных, полученных в результате обработки вольтамперных кривых (рис. 1). Вычисление полной энергии λ_{Π} из E , j -кривых проводили с использованием электрохимического уравнения для энергии активации процесса:

$$A_0^{wa} = W_{Ox} + \frac{(\lambda_{\Pi} + nF\Delta E + W_{Ox})^2}{4\lambda_{\Pi}}, \quad (8)$$

где $W_{Ox} = qF\psi'$ — энергия сближения реагирующих частиц с поверхностью электрода; ψ' — пси-потенциал; q — заряд реагирующих частиц.

Скорость катодного процесса при существенном отклонении от равновесия ($\Delta E \geq RT/nF$), избытке индифферентного вещества и постоянной концентрации деполаризатора описывается таким уравнением:

$$j_k = K \exp\left(\frac{-A_0^{wa} + \alpha nF\Delta E}{RT}\right), \quad (9)$$

где K — константа скорости катодного процесса; остальные обозначения общепринятые.

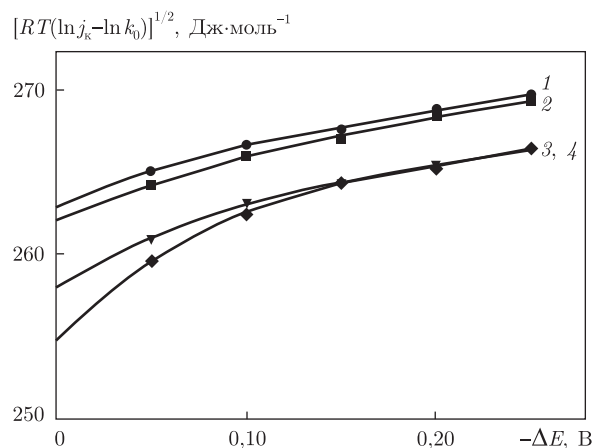


Рис. 2. Зависимость функции $[RT(\ln j_{\Delta E} - \ln k_0)]^{1/2}$ от перенапряжения ΔE в гидроксипалиниоацетатном электролите, содержащем $5,00 \cdot 10^{-4}$ моль \cdot л $^{-1}$ [Pdheida]; $5,00 \cdot 10^{-2}$ моль \cdot л $^{-1}$ H₂heida; 1,0 моль \cdot л $^{-1}$ NaClO₄, при pH 2,0 и температуре, °C: 22 (1), 30 (2), 40 (3), 50 (4)

Исходя из уравнения замедленного разряда (9) и учитывая, что $\lambda_{\Pi} \gg W_{Ox}$, поскольку потенциал диффузионной части двойного электрического слоя в условиях большой ионной силы близок к нулю ($\sim 0,001$ мВ; $W_{Ox} < 4$ кДж \cdot моль $^{-1}$), уравнение для тока в “маркусовских” координатах $[RT(\ln j_{\Delta E} - \ln k_0)]^{1/2} - \Delta E$ можно представить в виде:

$$[RT(\ln j_{\Delta E} - \ln k_0)]^{1/2} = \frac{\lambda_{\Pi}^{1/2}}{2} + \frac{nF}{2\lambda_{\Pi}^{1/2}} \Delta E, \quad (10)$$

где k_0 — константа скорости катодного процесса при стандартном потенциале; остальные обозначения общепринятые.

Экспериментальные E , j -кривые восстановления палладия (II) из гидроксипалиниоацетатного электролита при pH 2,0 (см. рис. 1), обработанные в координатах $[RT(\ln j_{\Delta E} - \ln k_0)]^{1/2} - \Delta E$ (уравнение (10)), демонстрирует рис. 2. Отсюда значение полной энергии реорганизации системы, вычисленное из величины отрезка $\lambda_{\Pi}^{1/2}$, отсекаемого функцией $[RT(\ln j_{\Delta E} - \ln k_0)]^{1/2} = f(\Delta E)$ на оси ординат, в исследуемом электролите при 22 °C равно 276,8 кДж \cdot моль $^{-1}$.

Зависимость полной энергии реорганизации системы от перенапряжения при температурах 22, 30, 40 и 50 °C представлена на рис. 3. Результаты, полученные расчетным и экспериментальным методами, достаточно хорошо совпадают, что свидетельствует об их достоверности.

Зависимость полной энергии реорганизации системы от температуры иллюстрирует рис. 4. Как следует из рисунка, полная энергия реорганизации уменьшается с увеличением температуры гидроксипалиниоацетатного электролита от 22 до 50 °C примерно на 17 кДж \cdot моль $^{-1}$.

Таким образом, нами предложен метод расчета полной энергии λ_{Π} , энергии λ_p и энергии реорганизации (перестройки внутренней координационной сферы) λ_k при восстановлении гидроксипалиниоацетатных комплексов палладия (II). Вычисленные значения энергии реорганизации растворителя и энергии реорганизации внутренней координационной сферы комплексного иона $[Pd(\text{heida})_2]^{2-}$ находятся в согласии с теорией Маркуса и Догонадзе–Кузнецова.

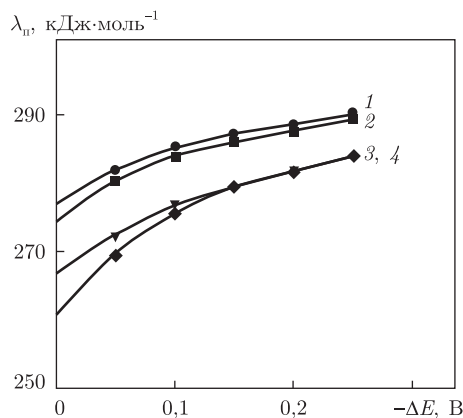


Рис. 3. Зависимость полной энергии реорганизации системы от перенапряжения в гидроксипалиминодиоацетатном электролите палладирования при температуре, °С: 22 (1), 30 (2), 40 (3), 50 (4)

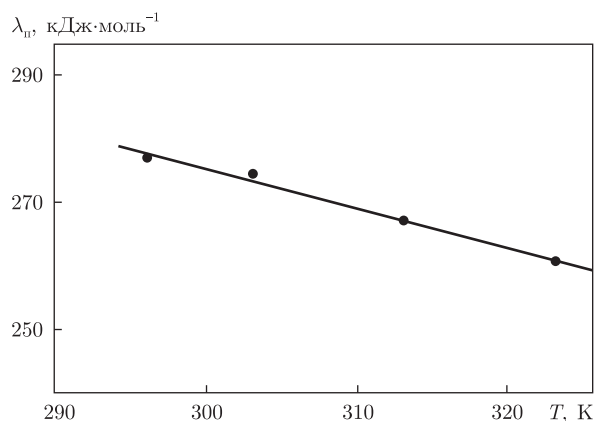


Рис. 4. Зависимость полной энергии реорганизации системы в гидроксипалиминодиоацетатном электролите палладирования от температуры

Впервые предложен экспериментальный метод определения полной энергии реорганизации при восстановлении координационных ионов из вольтамперных зависимостей, построенных в “маркусовских” координатах. Установлена зависимость полной энергии реорганизации системы от температуры гидроксипалиминодиоацетатного электролита. Полученные экспериментальные данные хорошо совпадают с расчетными.

1. Догондзе Р. Р., Кузнецов А. М. Кинетика и катализ. Кинетика гетерогенных химических реакций в растворах. Т. 5. – Москва: ВИНТИ, 1978. – 223 с.
2. Кублановский В. С., Никитенко В. Н., Руденко К. П. Кинетика электровосстановления палладия (II) из гидроксипалиминодиоацетатного электролита // Укр. хим. журн. – 2012. – **78**, № 5. – С. 47–51.
3. Энтеллис С. Г., Тигер Р. П. Кинетика реакций в жидкой фазе. – Москва: Химия, 1973. – 416 с.
4. Дамаскин Б. Б., Петрий О. А., Цырлина Г. А. Электрохимия. – Москва: Химия, 2006. – 672 с.
5. Kublanovsky V. S., Nikitenko V. N., Rudenko K. P. Electrodeposition of palladium coatings from iminodiacetate electrolyte // Amer. J. Anal. Chem. – 2013. – **4**. – Р. 642–646.
6. Кублановский В. С., Никитенко В. Н., Руденко К. П. Электровосстановление бис-иминоацетатных комплексов палладия (II) на палладиевом электроде // Укр. хим. журн. – 2009. – **75**, № 7. – С. 56–61.
7. Каданер Л. И. Электроосаждения благородных и рідкісних металів. – Київ: Техніка, 1968. – 192 с.

8. Кублановский В. С., Никитенко В. Н., Руденко К. П. Энергия активации электровосстановления бис-гидроксиэтилиминодиацетатных комплексов палладия (II) // Укр. хим. журн. – 2011. – **77**, № 5. – С. 38–43.
9. Никитенко В. Н., Руденко К. П. Составляющие энергии активации электровосстановления бис-иминодиацетатных и бис-гидроксиэтилиминодиацетатных комплексов палладия (II) // Вопр. химии и хим. технологии. – 2011. – № 4(2). – С. 87–89.
10. Антропов Л. И. Теоретическая электрохимия. – Москва: Высш. школа. – 1969. – 512 с.
11. Русских Я. В., Кравцов В. И. Кинетика и механизм электровосстановления бис-иминодиуксусных комплексов палладия (II) на ртутном каплюющем электроде // Электрохимия. – 1997. – **33**, № 10. – С. 1240–1247.
12. Anderegg G., Malik S. C. Komplexe XLVII. The stability of palladium(II) complexes with aminopolycarboxylate anions // Helv. Chim. Acta. – 1976. – **59**, No 5. – P. 1498–1511.

Институт общей и неорганической химии
им. В. И. Вернадского НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 03.10.2013

В. С. Кублановський, В. М. Нікітенко, К. П. Руденко

Енергія реорганізації при розряді гідроксіетилімінодіацетатних комплексів палладію (II)

Розраховано повну енергію реорганізації системи та її складові — енергії реорганізації розчинника й реорганізації (перебудови внутрішньої координаційної сфери) реагуючого комплексного іона при відновленні гідроксіетилімінодіацетатних комплексів палладію (II). Обчислені значення енергії реорганізації розчинника та енергії реорганізації внутрішньої координаційної сфери комплексного іона $[Pd(heida)_2]^{2-}$ узгоджуються з теорією Маркуса та Догонадзе–Кузнецова. Запропоновано експериментальний метод аналізу вольтамперних залежностей в “маркусовських” координатах, який дозволяє визначити (оцінити) повну енергію реорганізації при відновленні координаційних іонів. Установлено залежність повної енергії реорганізації системи від температури гідроксіетилімінодіацетатного електроліту. Експериментально отримані дані добре збігаються з розрахунковими.

V. S. Kublanovsky, V. N. Nikitenko, K. P. Rudenko

Reorganization energy in the discharge of palladium(II) hydroxyethyliminodiacetate complexes

The total reorganization energy of a system and its components (the solvent reorganization energy and the rearrangement energy of the first coordination sphere of a reacting complex ion in the reduction of palladium (II) hydroxyethyliminodiacetate complexes) have been calculated. The calculated values of solvent reorganization energy and the reorganization energy of the first coordination sphere of complex ion $[Pd(heida)_2]^{2-}$ are in agreement with the Marcus and Dogonadze–Kuznetsov theory. An experimental method for the analysis of current – potential curves in the Marcus coordinates is proposed. It allows one to estimate the total energy of reorganization in the reduction of coordination ions. The dependence of the total reorganization energy of the system on the temperature of the hydroxyethyliminodiacetate electrolyte has been established. The experimental data obtained are in good agreement with calculated ones.

Ю. О. Тітов, Н. М. Білявина, В. Я. Марків,
член-кореспондент НАН України М. С. Слободяник, В. В. Чумак

Особливості будови п'ятишарової структури ізоморфнозаміщених фаз типу $\text{CaLn}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$

Методом рентгенівської порошкової дифракції визначено шарувату перовскітоподібну структуру (ШПС) $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ (пр. гр. $P2_1/b$, $a = 0,7671(3)$ нм, $b = 3,145(1)$ нм, $c = 0,5444(2)$ нм, $\gamma = 96,99(2)^\circ$, $R_B = 0,086$). Встановлено основні риси кристалохімічного механізму ізоморфного заміщення атомів рідкісноземельних елементів (РЗЕ) у ШПС $\text{CaLn}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$. Характер локалізації атомів Ca, Ln і Ln^{I} у ШПС $\text{CaLn}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ не залежить від симетрії кристалічної ґратки. Для атомів Ca і РЗЕ характерно часткове упорядкування із переважною локалізацією атомів Ca у центрі та в проміжних шарах перовскітоподібних блоків, а атомів РЗЕ — на границях блоків, причому атоми Ln^{I} впорядковано розташовані лише на границях блоків.

Підвищена увага до представників сімейства оксидних сполук типу $A_nB_nO_{3n+2}$ (A — Ca, Sr; La — Nd; B — Ti, Nb, Ta; n — число шарів октаєдрів BO_6 у перовскітоподібному блоці) з шаруватою перовскітоподібною структурою (ШПС) обумовлена наявністю в них комплексу (сегнето-, п'єзоелектричних, електретних, магнітних, оптичних) цінних властивостей [1].

Одним із основних шляхів регулювання характеристик сполук типу $A_nB_nO_{3n+2}$ є ізоморфне заміщення атомів у різних кристалографічних позиціях їх ШПС.

До головних факторів, які визначають можливість і межі ізоморфного заміщення, відносяться зміни в будові твердих розчинів. На прикладі фаз із ШПС $\text{CaLa}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ і $\text{CaLa}_{3,25}\text{Dy}_{0,75}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ [2] досліджено кристалохімічний механізм ізовалентного заміщення атомів лантану в ШПС п'ятишарового представника сполук типу $A_nB_nO_{3n+2}$ — $\text{CaLa}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$. Однак отримані нами висновки не можуть бути поширені на інші п'ятишарові титанати $\text{CaLn}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ (Ln — Pr, Nd), оскільки їх ШПС, на відміну від ромбічного $\text{CaLa}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$, належить до моноклінної сингонії [3, 4].

Метою даної роботи було визначення будови ШПС представника Pr-вмісних фаз типу $\text{CaPr}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ та пошук загальних закономірностей будови як моноклінної, так і ромбічної ШПС ізовалентнозаміщених п'ятишарових титанатів $\text{CaLn}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ (Ln — La — Nd). Як об'єкт дослідження вибрано фазу $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ з максимально можливим ступенем заміщення атомів празеодиму на атоми гадолінію [5].

Полікристалічні зразки $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ було синтезовано термообробкою (1670 K, $\tau = 2$ год) шихти спільноосаджених гідроксикарбонатів. Кристалічну структуру $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ визначали методом порошку. Дифрактограми записано в дискретному режимі (крок сканування $0,03^\circ$, експозиція в точці 5 с) на мідному фільтрованому випромінюванні. Управління процесом зйомки та збором інформації, початкова обробка дифрактограм, а також структурні розрахунки виконано з використанням апаратно-програмного комплексу [6].

Індексування дифрактограм синтезованого термообробкою спільноосаджених гідроксикарбонатів $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ показало належність його кристалічної структури до моноклін-

ної сингонії. Систематика погасань відбиттів на дифрактограмах $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ відповідає центросиметричній просторовій групі симетрії $P2_1/b$.

Побудову початкових моделей структури $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ проведено з використанням координат атомів моноклінного $\text{CaPr}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ [4]. Враховуючи близькість факторів атомного розсіювання празеодиму й гадолінію, на першому етапі було виконано уточнення трьох моделей структури $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ із локалізацією атомів Gd у центрі, в проміжному положенні та на краях перовськітоподібного блока.

Результати уточнення цих моделей показали, що при розташуванні атомів Gd у центрі перовськітоподібного блока значення фактора недостовірності R_B незадовільно високе ($R_B > 0,13$). Зміщення місця розташування атомів Gd у напрямі краю блока знижує величину R_B , а найменше її значення (0,086) зафіксовано для моделі із розташуванням атомів Gd на краю перовськітоподібного блока. Це дає підстави для висновку, що в ШПС $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ має місце впорядкована локалізація атомів Gd у позиціях A(1) й A(2) на границях блоків і частково впорядковане розміщення атомів Pr із переважною локалізацією в центрі (позиція A(3)) та в проміжних положеннях (позиції A(4) й A(5)) перовськітоподібного блока.

Отримані кристалографічні і дифракційні дані для ШПС $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ наведено в табл. 1, 2 і на рис. 1–3. Визначений при розрахунку структури склад $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ відповідає (в межах похибки визначення) експериментально заданому.

Основні риси будови ШПС $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ подібні таким для ШПС вихідного титанату $\text{CaPr}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$. Кристалічна структура $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ утворена двовимірними перовськітоподібними блоками, кожен з яких складається з п'яти шарів, сполучених вершинами деформованих (відстані Ti–O знаходяться в межах 0,180–0,229 нм) октаедрів TiO_6 . Блоки послідовно чергуються вздовж осі Y і зміщені один відносно іншого в напрямі осі X на половину періоду a (див. рис. 2, 3). З'єднання сусідніх блоків здійснюється через зв'язки $-\text{O}-(\text{Ca}, \text{Pr}, \text{Gd})(1,2)-\text{O}-$ за допомогою зміщених до країв блока зовнішньоблочних атомів типу $(\text{Ca}, \text{Pr}, \text{Gd})(1)$ і $(\text{Ca}, \text{Pr}, \text{Gd})(2)$.

У найближче оточення зовнішньоблочних атомів $(\text{Ca}, \text{Pr}, \text{Gd})(1)$ і $(\text{Ca}, \text{Pr}, \text{Gd})(2)$ (відстані $(\text{Ca}, \text{Pr}, \text{Gd})-\text{O}- \leq 0,319-0,329$ нм) входять вісім атомів кисню того самого блока та два атоми кисню сусіднього блока. Наступний — одинадцятий — атом кисню віддалений від атомів $(\text{Ca}, \text{Pr}, \text{Gd})(1)$ та $(\text{Ca}, \text{Pr}, \text{Gd})(2)$ на відстані 0,341 і 0,369 нм відповідно. Серед поліедрів $(\text{Ca}, \text{Pr}, \text{Gd})\text{O}_k$ найбільша ступінь деформації встановлена для зовнішньоблочних поліедрів $(\text{Ca}, \text{Pr}, \text{Gd})(1)\text{O}_{10}$ і $(\text{Ca}, \text{Pr}, \text{Gd})(2)\text{O}_{10}$, а серед октаедрів TiO_6 найменш деформованими є розташовані в центрі перовськітоподібного блока октаедри $\text{Ti}(5)\text{O}_6$ й $\text{Ti}(6)\text{O}_6$ (див. табл. 2).

Зіставлення характеру розподілу атомів Ca, Ln й Ln^{I} у ШПС $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ (моноклінна ґратка) із таким у ШПС решти сполук і фаз типу $\text{CaLn}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ (Ln — La, Pr, Nd; Ln^{I} — Gd, Dy) (ромбічна або моноклінна ґратка) (табл. 3) показало, що в усіх цих об'єктах має місце часткове упорядкування атомів Ca і РЗЕ із переважною локалізацією атомів РЗЕ на границях блока, а атомів Ca у центрі та в проміжних шарах октаедрів TiO_6 перовськітоподібного блока. Це дає підстави для такого висновку: переважне розташування атомів РЗЕ на границях перовськітоподібних блоків фаз типу $\text{CaLn}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ не залежить від симетрії кристалічної ґратки і є типовим для їх ШПС. Однією із основних причин такого характеру локалізації атомів Ln й Ca є, очевидно, більш ковалентний характер зв'язків Ln–O у порівнянні із зв'язками Ca–O, оскільки зшивка сусідніх перовськітоподібних блоків вимагає істотної направленості зв'язків Me–O.

Таблиця 1. Кристалографічні характеристики $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ (пр. гр. $P2_1/b$)

| Позиція | Атом | X | Y | Z | Заповнення | Позиція | Атом | X | Y | Z |
|--|-------|-----------|-----------|--|------------|---------|-------|----------|----------|----------|
| 4e | Ca(1) | 0,3547(5) | 0,2040(3) | 0,5501(6) | 0,20(2) | 4e | O(1) | 0,507(4) | 0,536(3) | 0,201(4) |
| 4e | Pr(1) | 0,3547(5) | 0,2040(3) | 0,5501(6) | 0,34(2) | 4e | O(2) | 0,010(3) | 0,537(3) | 0,195(5) |
| 4e | Gd(1) | 0,3547(5) | 0,2040(3) | 0,5501(6) | 0,46(2) | 4e | O(3) | 0 | 0,453(3) | 0,304(5) |
| 4e | Ca(2) | 0,8652(6) | 0,2167(4) | 0,6047(5) | 0,10(2) | 4e | O(4) | 0,5 | 0,452(2) | 0,310(4) |
| 4e | Pr(2) | 0,8652(6) | 0,2167(4) | 0,6047(5) | 0,38(2) | 4e | O(5) | 0,25 | 0,5 | 0,434(5) |
| 4e | Gd(2) | 0,8652(6) | 0,2167(4) | 0,6047(5) | 0,52(2) | 4e | O(6) | 0,090(3) | 0,212(4) | 0,324(6) |
| 4e | Ca(3) | 0,25 | 0,5 | 0,0070(5) | 0,20(2) | 4e | O(7) | 0,617(5) | 0,213(2) | 0,321(4) |
| 4e | Pr(3) | 0,25 | 0,5 | 0,0070(5) | 0,80(2) | 4e | O(8) | 0,064(4) | 0,120(2) | 0,196(5) |
| 4e | Ca(4) | 0,2307(6) | 0,4086(2) | 0,4978(6) | 0,20(2) | 4e | O(9) | 0,558(4) | 0,123(2) | 0,206(4) |
| 4e | Pr(4) | 0,2307(6) | 0,4086(2) | 0,4978(6) | 0,80(2) | 4e | O(10) | 0,075(3) | 0,137(3) | 0,755(6) |
| 4e | Ca(5) | 0,7084(5) | 0,4118(5) | 0,5050(5) | 0,30(2) | 4e | O(11) | 0,580(6) | 0,135(3) | 0,770(5) |
| 4e | Pr(5) | 0,7084(5) | 0,4118(5) | 0,5050(5) | 0,70(2) | 4e | O(12) | 0,412(5) | 0,274(3) | 0,305(4) |
| 4e | Ti(1) | 0,4077(5) | 0,3180(4) | 0,5398(6) | 1 | 4e | O(13) | 0,868(6) | 0,273(2) | 0,310(4) |
| 4e | Ti(2) | 0,9040(6) | 0,3180(2) | 0,5398(5) | 1 | 4e | O(14) | 0,156(4) | 0,334(3) | 0,600(5) |
| 4e | Ti(3) | 0,4843(5) | 0,4029(3) | -0,0012(4) | 1 | 4e | O(15) | 0,674(4) | 0,336(3) | 0,59(4) |
| 4e | Ti(4) | 0,9720(6) | 0,4068(3) | -0,0012(4) | 1 | 4e | O(16) | 0,214(4) | 0,401(4) | 0,040(3) |
| 2a | Ti(5) | 0 | 0,5 | 0,5 | 1 | 4e | O(17) | 0,720(6) | 0,405(4) | 0,080(3) |
| 2d | Ti(6) | 0,5 | 0,5 | 0,5 | 1 | | | | | |
| Параметри елементарної комірки, нм | | | | $a = 0,7671(3)$, $b = 3,145(1)$, $c = 0,5444(2)$, $\gamma = 96,99(2)^\circ$ | | | | | | |
| Незалежні відбиття | | | | 539 | | | | | | |
| Загальний ізотропний В-фактор, нм ² | | | | $0,24(3) \cdot 10^{-2}$ | | | | | | |
| Параметр текстури [7] | | | | $\tau = 1,256(8)$, вісь текстури [010] | | | | | | |
| Фактор недостовірності | | | | $R_B = 0,086$ | | | | | | |

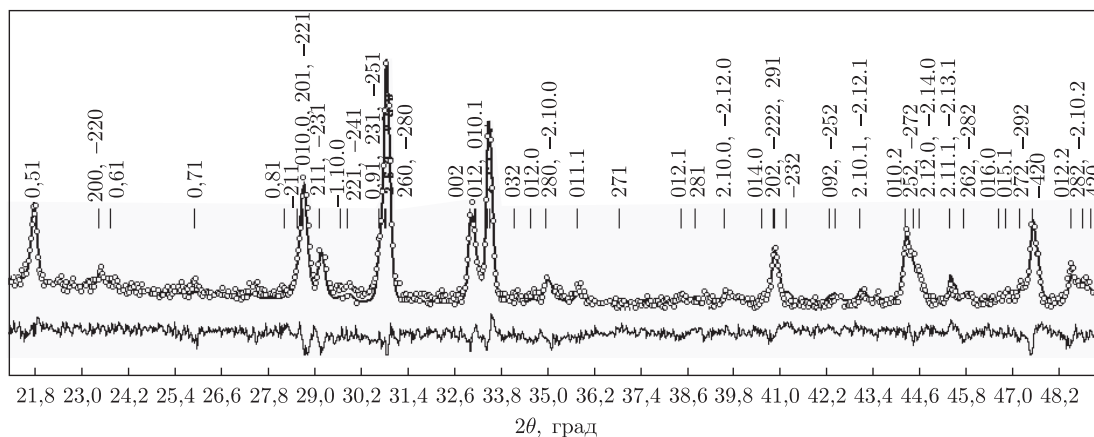


Рис. 1. Експериментальна (кружки), розрахована (суцільна лінія) та різницева (нижня лінія) дифрактограми $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ ($\text{Cu K}\alpha_1$ випромінювання)

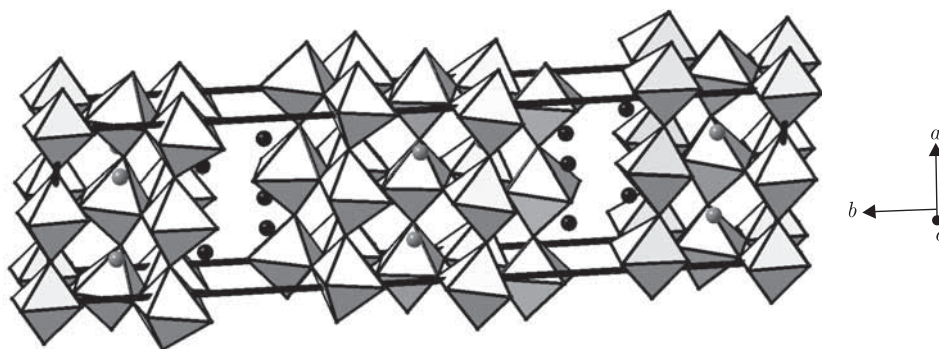


Рис. 2. Кристалічна структура $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ у вигляді октаедрів TiO_6 та атомів (Ca, Pr, Gd) (1, 2) (чорні кружки) і атомів (Ca, Pr) (3, 4, 5) (сірі кружки)

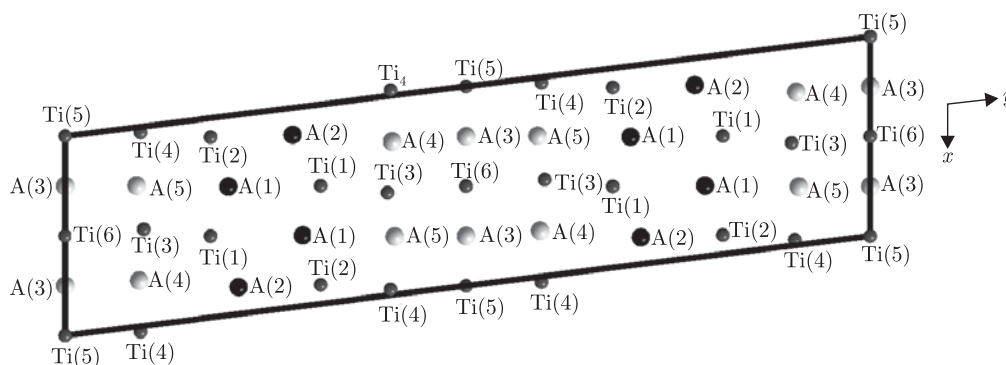


Рис. 3. Проекція кристалічної структури $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ на площину xy (наведені тільки важкі атоми) (A(1) – $0,20\text{Ca} + 0,34\text{Pr} + 0,46\text{Gd}$, A(2) – $0,10\text{Ca} + 0,38\text{Pr} + 0,52\text{Gd}$, A(3) – $0,20\text{Ca} + 0,80\text{Pr}$, A(4) – $0,20\text{Ca} + 0,80\text{Pr}$, A(5) – $0,30\text{Ca} + 0,70\text{Pr}$)

Аналіз способів розташування атомів Ln і Ln^{I} у п'ятишарових перовскітоподібних блоках моноклінної ШПС $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ та ромбічної ШПС $\text{CaLa}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ (див. табл. 1, 3) показав, що характер їх локалізації також не залежить від симетрії

кристалічної ґратки. Так, навіть при ступенях заміщення атомів Ln у $\text{CaLn}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ наближених до максимально можливого, атоми Ln^{I} розташовуються лише у зовнішніх поліедрах AO_{10} на границях перовськітоподібних блоків, які задіяні у “зшивці” блоків між собою через зв’язки $-\text{O}-\text{A}(3)-\text{O}-$.

Таблиця 2. Довжини деяких міжатомних відстаней Me–O та ступінь деформації поліедрів MeO_k (Δ) у кристалічній структурі $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$

| Атоми | Відстань, нм | Поліедр | Ступінь деформації Δ |
|--|--------------|---------------------------------|-----------------------------|
| (Ca, Pr, Gd)(1)– $\text{O}_{\text{сер}}$ | 0,272 | (Ca, Pr, Gd)(1) O_{10} | $151 \cdot 10^{-4}$ |
| (Ca, Pr, Gd)(2)– $\text{O}_{\text{сер}}$ | 0,273 | (Ca, Pr, Gd)(2) O_{10} | $212 \cdot 10^{-4}$ |
| (Ca, Pr)(3)– $\text{O}_{\text{сер}}$ | 0,277 | (Ca, Pr)(3) O_{12} | $110 \cdot 10^{-4}$ |
| (Ca, Pr)(4)– $\text{O}_{\text{сер}}$ | 0,269 | (Ca, Pr)(4) O_{12} | $94 \cdot 10^{-4}$ |
| (Ca, Pr)(5)– $\text{O}_{\text{сер}}$ | 0,267 | (Ca, Pr)(5) O_{12} | $98 \cdot 10^{-4}$ |
| Ti(1)– $\text{O}_{\text{сер}}$ | 0,200 | Ti(1) O_6 | $28 \cdot 10^{-4}$ |
| Ti(2)– $\text{O}_{\text{сер}}$ | 0,197 | Ti(2) O_6 | $28 \cdot 10^{-4}$ |
| Ti(3)– $\text{O}_{\text{сер}}$ | 0,203 | Ti(3) O_6 | $78 \cdot 10^{-4}$ |
| Ti(4)– $\text{O}_{\text{сер}}$ | 0,199 | Ti(4) O_6 | $31 \cdot 10^{-4}$ |
| Ti(5)– $\text{O}_{\text{сер}}$ | 0,193 | Ti(5) O_6 | $18 \cdot 10^{-4}$ |
| Ti(6)– $\text{O}_{\text{сер}}$ | 0,192 | Ti(6) O_6 | $11 \cdot 10^{-4}$ |
| (Ca, Pr, Gd)(1)– $\text{O}(12)^*$ | 0,257(3) | | |
| (Ca, Pr, Gd)(1)– $\text{O}(7)^*$ | 0,298(2) | | |
| (Ca, Pr, Gd)(2)– $\text{O}(13)^*$ | 0,239(3) | | |
| (Ca, Pr, Gd)(2)– $\text{O}(6)^*$ | 0,253(3) | | |

Примітка. Ступінь деформації поліедрів MeO_k у ШПС $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ розрахована за формулою $\Delta = 1/n \sum [(R_i - \bar{R})/\bar{R}]^2$ (де R_i – відстані Me–O, \bar{R} – середня відстань, Me–O, k – координаційне число).
* Міжблочна відстань.

Таблиця 3. Характер заповнення позицій типу А в ШПС сполук та фаз типу $\text{CaLn}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ та їх деякі кристалохімічні характеристики

| Сполука | Місцезнаходження шару в блоці | Заповнення позиції типу А в даному місці блока ($x\text{A}^{\text{I}} + y\text{A}^{\text{II}}$) |
|--|-------------------------------|---|
| $\text{CaLa}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ пр. гр. Pmnn [3] | Краї блока | (0,12Ca + 0,88La) |
| | Проміжне | (0,23Ca + 0,77La) |
| | Центр блока | (0,25Ca + 0,75La) |
| $\text{CaLa}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ пр. гр. Pmnn [2] | Краї блока | (0,13Ca + 0,37La + 0,50Gd) |
| | Проміжне | (0,27Ca + 0,73La) |
| | Центр блока | (0,20Ca + 0,80La) |
| $\text{CaLa}_{3,25}\text{Dy}_{0,75}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ пр. гр. Pmnn [2] | Краї блока | (0,13Ca + 0,58La + 0,29Dy) |
| | Проміжне | (0,27Ca + 0,73La) |
| | Центр блока | (0,20Ca + 0,80La) |
| $\text{CaPr}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ пр. гр. P2 ₁ /b [4] | Краї блока | (0,135Ca + 0,865Pr)* |
| | Проміжне | (0,25Ca + 0,75Pr)* |
| | Центр блока | (0,23Ca + 0,77Pr) |
| $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ пр. гр. P2 ₁ /b | Краї блока | (0,15Ca + 0,36Pr + 0,49Gd)* |
| | Проміжне | (0,25Ca + 0,75Pr)* |
| | Центр блока | (0,20Ca + 0,80Pr) |
| $\text{CaNd}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ пр. гр. P2 ₁ /b [4] | Краї блока | (0,135Ca + 0,865Nd)* |
| | Проміжне | (0,25Ca + 0,75Nd)* |
| | Центр блока | (0,23Ca + 0,77Nd) |

* Середнє значення двох позицій атомів типу А, які розташовані в даному місці перовськітоподібного блока (сполуки і фази типу $\text{CaLn}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ із $a \approx 2a_{\text{пер}}$).

На відміну від ізовалентного заміщення атомів La на атоми Gd й Dy у ШПС $\text{CaLa}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ [2, 3], входження атомів Gd у ШПС моноклінного $\text{CaPr}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ не призводить до істотного зростання довжин міжблочних зв'язків $-\text{O}-\text{A}-\text{O}-$ та ступеня деформації зовнішньоблочних поліедрів AO_{10} . Однак відзначимо, що середнє значення довжини міжблочної відстані $(\text{Ca}, \text{Ln}, \text{Ln}^{\text{I}})-\text{O}$ для $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ (0,262 нм) практично збігається з таким як для $\text{CaPr}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ (0,263 нм), так і для La-вмісних фаз $\text{CaLa}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ (0,262 нм) $\text{CaLa}_{3,25}\text{Dy}_{0,75}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ (0,263 нм) з близькими до максимальних ступенями заміщення атомів лантану. Це свідчить про те, що для даних фаз середня довжина міжблочної відстані 0,262–0,263 нм є максимально можливою і при її перевищенні відбувається дестабілізація їх ШПС внаслідок зменшення міцності зв'язування перовскітоподібних блоків між собою.

Таким чином, результати визначення ШПС фази $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ та їх порівняльний аналіз із особливостями будови ШПС фаз $\text{CaLa}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ ($\text{Ln}^{\text{I}} - \text{Gd}, \text{Dy}$) та сполук $\text{CaLn}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ ($\text{Ln} - \text{Pr}, \text{Nd}$) дали змогу вперше узагальнити основні риси кристалохімічного механізму ізоморфного заміщення атомів РЗЕ в п'ятишаровій ШПС титанатів $\text{CaLn}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ за схемою $\text{CaLn}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$. Отримані дані є підґрунтям для направленої синтезу нових ізоморфнозаміщених фаз цього типу.

1. *Lichtenberg F., Herrnberger A., Wiedenmann K., Mannhart J.* Synthesis of perovskite-related layered $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2} = \text{ABO}_x$ type niobates and titanates and study of their structural, electric and magnetic properties // *Prog. Sol. State Chem.* – 2001. – **29**, No 1. – P. 1–70.
2. *Титов Ю. О., Білявіна Н. М., Марків В. Я. та ін.* Взаємозв'язок характеру локалізації атомів РЗЕ та меж ізоморфного заміщення в шаруватій структурі $\text{CaLa}_{4-x}\text{Ln}_x\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ // *Доп. НАН України.* – 2005. – № 10. – С. 153–158.
3. *Титов Ю. О., Білявіна Н. М., Марків В. Я. та ін.* Кристалічна структура $\text{A}^{\text{II}}\text{La}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ ($\text{A}^{\text{II}} = \text{Ca}, \text{Sr}$) // *Там само.* – 2004. – № 10. – С. 147–152.
4. *Слободяник М. С., Титов Ю. О., Білявіна Н. М. та ін.* Кристалічна структура $\text{SrPr}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ і $\text{CaLn}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ ($\text{Ln} = \text{Pr}, \text{Nd}$) // *Там само.* – 2005. – № 4. – С. 136–142.
5. *Титов Ю. О., Слободяник М. С., Чумак В. В.* Умови ізовалентного заміщення атомів РЗЕ в п'ятишаровій перовскітоподібній структурі $\text{CaLn}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ // *Укр. хім. журн.* – 2006. – **72**, № 7. – С. 3–6.
6. *Марків В. Я., Білявіна Н. М.* Апаратно-програмний комплекс для дослідження полікристалічних речовин за їх дифракційними спектрами // *Тез. доп. Другої міжнар. конф. “Конструкційні та функціональні матеріали”*, Львів, 14–16 жовт. 1997. – Львів: Вид-во наук. тов.-ва ім. Т. Г. Шевченка, 1997. – С. 260–261.
7. *Печарский В. К., Аксельруд Л. Г., Завалий П. Ю.* О методе учета влияния преимущественной ориентации (текстуры) в порошковом образце при исследовании структуры вещества // *Кристаллография.* – 1987. – **32**, № 4. – С. 874–877.

Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 26.07.2013

Ю. А. Титов, Н. М. Білявіна, В. Я. Марків,
член-кореспондент НАН України **Н. С. Слободяник, В. В. Чумак**

Особенности строения пятислойной структуры изоморфнозамещенных фаз типа $\text{CaLn}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$

Методом рентгеновської порошкової дифракції определена слоистая перовскитоподобная структура (СПС) $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ (пр. гр. $P2_1/b$, $a = 0,7671(3)$ нм, $b = 3,145(1)$ нм, $c = 0,5444(2)$ нм, $\gamma = 96,99(2)^\circ$, $R_B = 0,086$). Установлены основные детали кристаллохимического механизма изоморфного замещения атомов редкоземельных элементов (РЗЭ) в СПС

$\text{CaLn}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$. Характер локализации атомов Ca, Ln и Ln^{I} в СПС $\text{CaLn}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ не зависит от симметрии кристаллической решетки. Для атомов Ca и РЗЭ характерно частичное упорядочение с преимущественной локализацией атомов Ca в центре и в промежуточных слоях перовскитоподобных блоков, а атомов РЗЭ — на границах блоков, причем атомы Ln^{I} упорядочено расположены лишь на границах блоков.

Y. A. Titov, N. M. Belyavina, V. Ya. Markiv,

Corresponding Member of the NAS of Ukraine **M. S. Slobodyanik, V. V. Chumak**

Constitution peculiarities of the five-layer structure of isomorphically substituted phases of $\text{CaLn}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ type

The crystal layer of $\text{CaPr}_3\text{GdTi}_5\text{O}_{17}$ perovskite-like structure (LPS) is determined by X-ray powder diffraction (sp. gr. $P2_1/b$, $a = 0.7671(3)$ nm, $b = 3.145(1)$ nm, $c = 0.5444(2)$ nm, $\gamma = 96.99(2)^\circ$, $R_B = 0.086$). The basic details of the crystallochemical mechanism of isomorphic replacement of REE atoms in LPS $\text{CaLn}_4\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ are established. The character of the localization of Ca, Ln, and Ln^{I} atoms in LPS $\text{CaLn}_{4-x}\text{Ln}_x^{\text{I}}\text{Ti}_5\text{O}_{17}$ does not depend on the symmetry of a crystal lattice. As for Ca and REE atoms, the partial ordering with primary localization of Ca atoms at the center and in the intermediate layers of perovskite-like blocks is typical. REE atoms are on the boundaries of blocks, and Ln^{I} atoms are orderly located only on the boundaries of blocks.



УДК 631.528.6:633.34

Н. І. Адамчук-Чала, В. О. Яценко,
член-кореспондент НАН України Г. О. Іутинська

Вплив інокуляції *Bradyrhizobium japonicum* УКМ В-6035 на фотосинтетичний апарат сої

Досліджували архітекtonіку мікробного ценозу кореневої зони інокульованої бульбочковими бактеріями трансгенної сої, вирощеної в польових умовах, із паралельним моніторингом морфофункціонального стану фотосинтетичного апарату рослин методами електронної мікроскопії та дистанційної спектрофотометрії. Визначено збільшення кількості бактерій на поверхні головного кореня і в ризосфері інокульованої сої в порівнянні з рослинами без бактеризації. Морфометричні дослідження палісадного мезофілу інокульованих рослин виявили статистично значуще збільшення ширини мезофілу, площі клітин мезофілу, коефіцієнта палісадності, коефіцієнта пластичності, частки хлоропластів від загальної площі мезофілу порівняно з неінокульованими. Морфологічні зміни розвитку фотомембран підтверджені спектрометричними вимірюваннями головних пігментів пластинки листка.

Фіксація молекулярного азоту бульбочковими бактеріями тісно пов'язана із фіксацією діоксиду вуглецю в процесі фотосинтезу [1–4]. При відновленні молекулярного азоту мікроорганізми-азотфіксатори використовують енергію макроергічних зв'язків АТФ, джерелом яких є фотоасиміляти, синтезовані в листках рослини-живителя.

В умовах спонтанного симбіозу бобових рослин [5, 6] збільшується асиміляційна поверхня фотосинтетичного апарату, розміри клітин мезофілу та поліморфізм хлоропластів.

Відомо, що за інокуляції бульбочковими бактеріями у бобових рослин зростає вміст хлорофілів a і b [1], а також сумарний вміст хлорофілів $(a + b)$ [7]. Підтверджено позитивний вплив інокуляції на площу фотосинтетичної поверхні листків, накопичення біомаси і врожай рослин, але морфолого-анатомічні та ультраструктурні зміни фотосинтетичного апарату інокульованих рослин на сьогодні майже не вивчені.

Тому ми ставили за мету дослідити архітекtonіку мікробіоценозу кореневої зони та морфофункціональні показники фотосинтетичного апарату сої, інокульованої *Bradyrhizobium japonicum* УКМ В-6035.

Матеріали і методи. Дослідження проводили протягом двох років (2010–2011 рр.) на рослинному матеріалі сої лінії 40–3–2, який був відібраний з популяції трансгенної сої, що

характеризувалась ознакою толерантності до гліфосату. Польовий експеримент виконували в умовах мікростаціонарного досліду на базі Білоцерківської дослідно-селекційної станції — підрозділу Інституту біоенергетичних культур і цукрового буряка НААН України.

Для дослідження архітектоніки мікробного ценозу рослин сої, інокульованої *Bradyrhizobium japonicum* УКМ В-6035, використовували стерилізовану в етиловому спирті плівку обростання із поліетилентерефталату — біосумісного полімеру. Ця плівка є сучасною модифікацією скелець Холодного. Її розташовували вздовж головного кореня сої і досліджували на ділянках: поверхня кореня, а також прикоренева зона та в ризосфері на відстані 1 і 5 мм від кореня відповідно. Після експозиції плівки в кореневій зоні протягом 22 діб на її поверхні формувалась біоплівка обростання. Для мікроскопічних досліджень плівку обережно виймали з ґрунту і обробляли галактозоспецифічним лектином, міченим пероксидазою згідно з методикою виробника (кафедра зоології і ембріології Львівського національного медичного університету) [8]. Біоплівку фотографували у світлових мікроскопах (NU-2 та МТ 5300Н, Японія). Ідентифікація бактеріальної компоненти мікробіоценозу проводилася завдяки зв'язуванню на поверхні бактерій гранул мічених пероксидазою лектинів сої. При цьому бактерії набували темно-бурого відтінку, що відрізняло їх з-поміж інших механічних і рослинних компонентів ґрунту.

Ультраструктурну будову рослинних клітин вивчали на 10 непошкоджених, повністю розтягнутих зрілих листках 4-го ярусу з 5 рослин для кожного варіанта; висічки (2–3 мм) брали з середньої частини листків справа від центральної жилки.

Попередню фіксацію зразків здійснювали за умов вакуумної інфільтрації в розчині 2,5% глутарового альдегіду на 0,1 М фосфатному буфері (рН 7,0) при кімнатній температурі протягом 4 год. Зразки промивали в 0,1 М фосфатному буфері (дві зміни по 10 хв) і фіксували в розчині 1% OsO₄ на 0,1 М фосфатному буфері протягом 6 год. Фіксований матеріал промивали в тому ж буфері та зневоднювали в серії розчинів етанолу та ацетоні висхідної концентрації, просочували та заливали в суміш смол (епон/аралдит) за загальноприйнятою в електронній мікроскопії методикою. Ультратонкі зрізи (300 нм) пластинки листків отримували на ультрамікротомі, фарбували цитратом свинцю і досліджували в трансмісійному електронному мікроскопі JEM 1200 фірми EX (Японія). Зрізи фотографували та їх зображення сканували для кількісної обробки цифрових зображень.

Лінійні розміри та площі мезофілу вимірювали з мікрофотографій, використовуючи програму UTHSCSA ImageTool 3.0. Визначали такі показники: ширина мезофілу, площа клітин мезофілу, коефіцієнт палісадності (співвідношення ширини шару стовпчастого мезофілу до ширини губчастого шару), частка хлоропластів від загальної площі мезофілу, коефіцієнт пластичності (КП) [9].

Статистичну обробку даних виконували за допомогою програм Microsoft Office, Excel і Statistica 6.0. Середні морфолого-анатомічні значення порівнювали, використовуючи тест Student-Newman-Keuls [5].

Спектрометрія головних пігментів фотосинтезу проведена за спектрами відбиття з використанням лабораторного спектрометра Asp (Інституту космічних досліджень НАН України і ДКА України) за методикою, описаною в статтях [4, 10].

Результати і обговорення. На рис. 1 подано мікрофотографії плівки обростання, розташованої в кореневій зоні рослин, а також її збільшені фрагменти: 1 — прикоренева зона, 2 — поверхня кореня, 3 — ризосфера.

Результати підрахунку чисельності мікроорганізмів по окремих частинах кореневої зони наведені в табл. 1. Виявлено статистично достовірне збільшення кількості бактерій на

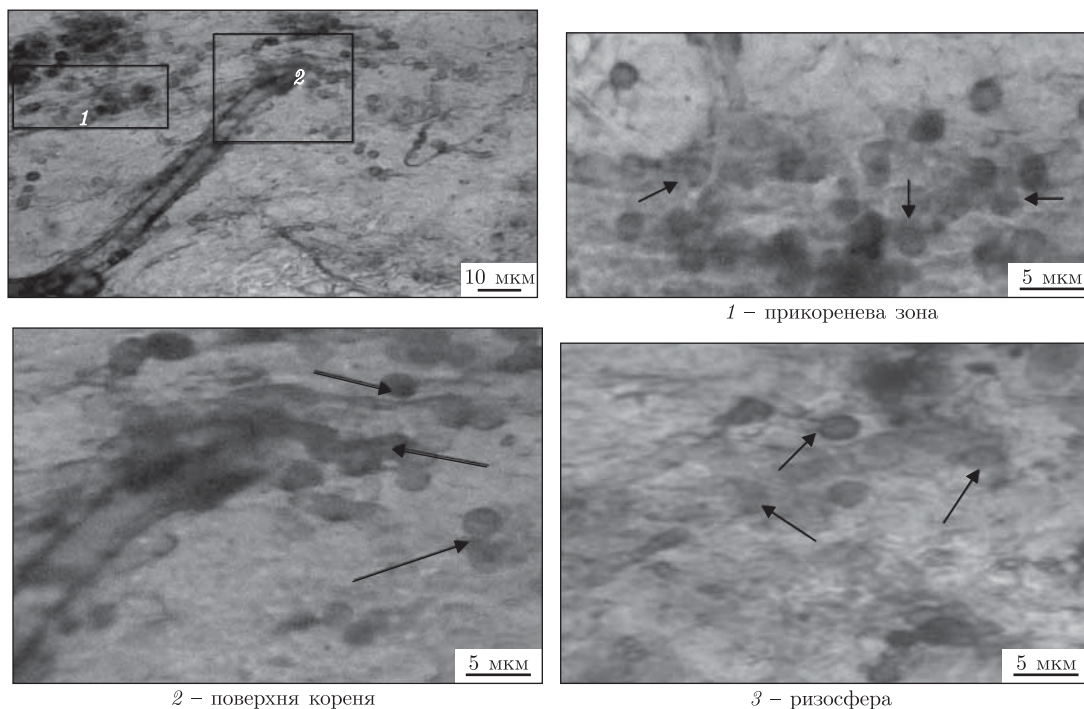


Рис. 1. Плівка обростання з фрагментом кореня сої, інокульованої *B. japonicum* УКМ В-6035. Стрілками вказані бактерії, виявлені за реакцією зв'язування мічених пероксидазою лектинів сої

поверхні головного кореня у 2,2 раза і в ризосфері в 1,7 раза в інокульованій сої порівняно з відповідними варіантами без інокуляції.

Відомо, що мікробіота є одним із головних чинників формування ефективних мікробно-рослинних систем [11], а передпосівна інокуляція насіння бактеріальними препаратами є важливим фактором, що впливає на розвиток фотосинтетичного апарату рослини [4, 5, 9].

Проведений нами аналіз поперечних зрізів листової пластинки сої показує типову організацію мезофілу, характерну для листків середньої формації дводольних рослин: 2–3 шари паралельно видовжених клітин стовпчастого або палисадного мезофілу, де переважно відбувається процес фотосинтезу, і губчастий або запасуючий мезофіл із розвиненим міжклітинним простором (рис. 2).

Інокуляція сприяла достовірному зростанню таких показників морфології мезофілу: ширини мезофілу — на 34,8%, площі клітин мезофілу — на 39,1%, коефіцієнта палисадності — на 17%. Майже на третину зростала частка хлоропластів від загальної площі мезофілу, що свідчить про більший розвиток фотосинтетичного апарату в інокульованих рослин (табл. 2).

Таблиця 1. Вплив інокуляції *B. japonicum* УКМ В-6035 на чисельність бактерій мікроценозу кореневої зони сої, кл./ 100 мкм² плівки обростання

| Варіант досліджу | Поверхня головного кореня | | Прикоренева зона | | Ризосфера | |
|---|---------------------------|----------|------------------|----------|-----------|----------|
| | <i>M</i> | <i>s</i> | <i>M</i> | <i>s</i> | <i>M</i> | <i>s</i> |
| Інокуляція <i>B. japonicum</i> УКМ В-6035 | 12,48 | 1,65 | 9,86 | 0,73 | 7,22 | 0,58 |
| Без інокуляції | 5,67 | 0,21 | 7,62 | 0,33 | 4,26 | 0,12 |

Примітка. *M* — середнє арифметичне, *s* — середньоквадратичне відхилення.

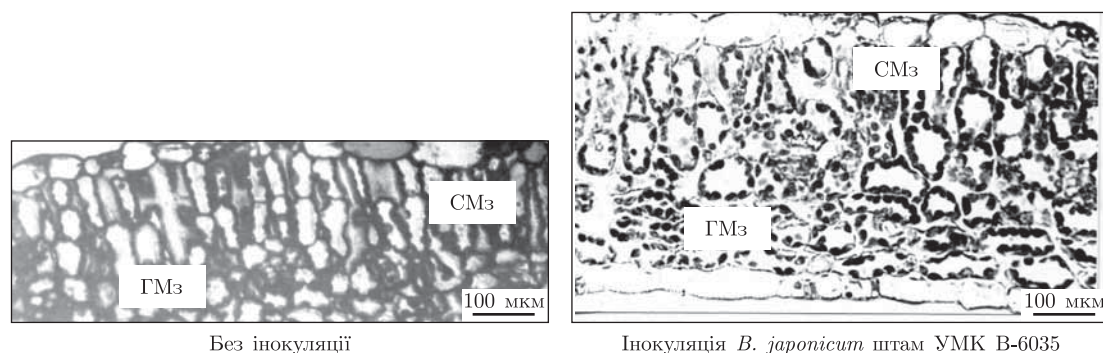


Рис. 2. Поперечний зріз пластинки листка сої.
СМз — стовпчастий мезофіл, ГМз — губчастий мезофіл

Інокульовані рослини сої характеризувалися високими показниками коефіцієнта пластичності (більше 0,5) за такими морфологічними ознаками, як: ширина мезофілу, площа клітин мезофілу і коефіцієнт палісадності, що вказує на більшу адаптаційну здатність фотосинтетичного апарату цих рослин.

Наступним етапом дослідження було проведення порівняльного аналізу ультраструктурної організації хлоропластів стовпчастого мезофілу листків інокульованих рослин сої.

Як видно з електронogram (рис. 3), хлоропласти інокульованих і неінокульованих рослин розташовувалися в периферійних шарах цитоплазми сильно вакуолізованих клітин палісадного мезофілу вздовж клітинної оболонки в контактах із мітохондріями. Хлоропласти інокульованих рослин містили більш розвинену систему фотомембран, яка складалася з тилакоїдів гран і об'єднуючих їх тилакоїдів строми.

Порівняльний ультраструктурний аналіз хлоропластів палісадного мезофілу (табл. 3) показав, що за умов інокуляції парціальний об'єм як тилакоїдів гран, так і тилакоїдів

Таблиця 2. Характеристики морфолого-анатомічної організації листків 4-го ярусу рослин сої

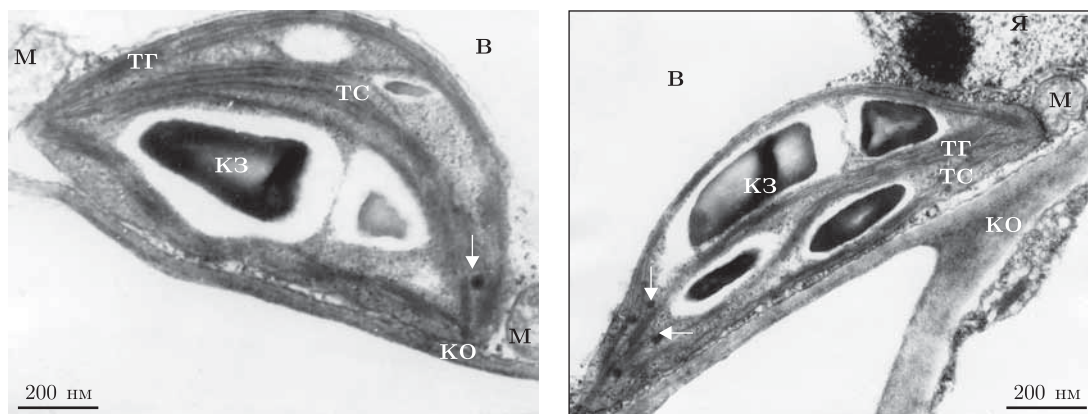
| Варіант досліджу | Ширина мезофілу | | Площа клітин мезофілу | | Коефіцієнт палісадності | | Частка хлоропластів від загальної площі мезофілу | |
|---|-----------------|------|-----------------------|------|-------------------------|------|--|------|
| | мкм | КП* | мкм ² | КП | Од. | КП | % | КП |
| Інокуляція <i>V. japonicum</i> УМК В-6035 | 356 ± 11 | 0,68 | 1287 ± 33 | 0,87 | 2,29 | 0,52 | 60,57 ± 2,27 | 0,35 |
| Без інокуляції | 264 ± 13 | 0,26 | 925 ± 21 | 0,74 | 1,96 | 0,42 | 42,81 ± 2,78 | 0,30 |

*КП — коефіцієнт пластичності визначається як відношення різниці між максимальним і мінімальним до середнього значення.

Таблиця 3. Співвідношення парціальних об'ємів компонентів хлоропластів палісадного мезофілу рослин сої

| Параметр | Інокуляція <i>V. japonicum</i> УМК В-6035 | Без інокуляції |
|---------------------|---|----------------|
| Тилакоїди гран, % | 22,73 ± 1,05* | 15,70 ± 0,50 |
| Тилакоїди строми, % | 12,55 ± 0,06* | 10,90 ± 0,09 |
| Крохмаль, % | 20,16 ± 1,43 | 20,94 ± 1,81 |
| Пластоглобули, % | 0,74 ± 0,34 | 1,50 ± 1,03* |
| Строма, % | 43,45 ± 1,89 | 50,96 ± 1,63 |

* $P \leq 0,05$, достовірні відмінності у порівнянні з варіантом без інокуляції.



Інокуляція *B. japonicum* штам УМК В-6035

Без інокуляції

Рис. 3. Ультраструктура хлоропластів клітин мезофілу сої: КО — клітинна оболонка, В — вакуоль, М — мітохондрія, ТГ — тилакоїди гран, ТС — тилакоїди строми, КЗ — крохмальне зерно, стрілками вказані пластоглобули

строми достовірно збільшився, що передбачає збільшення складових елементів цих фотомембран.

Відповідно до уявлень, розвинених у 80-х роках минулого сторіччя [12], в тилакоїдах строми локалізовані головним чином комплекси фотосистеми I (ФСІ), тоді як в тилакоїдах гран — пігмент-білкові комплекси фотосистеми II (ФСII) і головного світлозбирального комплексу [12]. Базуючись на електростатичній теорії Барбера, зазначимо, що в мембранах гран розташовуються пігмент-білкові комплекси ФСII і світлозбиральний комплекс хлорофілів *a/b*, а також пов'язаний із ФСII комплекс виділення кисню. В тилакоїдах строми містяться пігмент-білкові комплекси ФСІ і не пігментовані супрамолекулярні мембранні комплекси: АТФазний і цит *b/f* білкові комплекси, а також ряд білків, що входять до електронно-транспортного ланцюга, і пов'язані із функціонуванням ФСІ.

Виходячи з цих положень, можна сказати, що виявлене нами збільшення парціальних об'ємів тилакоїдів гран і тилакоїдів строми передусім може бути наслідком збільшення за експериментальних умов біосинтезу поліфункціональних компонентів фотомембран, що залучаються в систему перебудов фотосинтетичного апарату, пов'язаних із енергетичними взаємовідносинами макро- і мікросимбіонта, які регулюються на рівні генної експресії [2, 12], фітогормональної регуляції [2, 11] та обміну вторинних метаболітів [2].

Зіставлення ультраструктурних характеристик фотомембран хлоропластів із спектрометричними вимірюваннями головних пігментів листка дає можливість отримати фактичний матеріал і розширити наші уявлення про розподіл головних пігмент-білкових комплексів по різних ділянках тилакоїдів [12]. У роботі [5] показано, що надлишок синтезу пігмент-білкових комплексів акумулюється в пластоглобулах хлоропластів. За нашими даними (див. табл. 3), об'єм пластоглобул рослин без інокуляції збільшувався порівняно з таким інокульованих рослин, що є ознакою старіння хлоропластів [5].

Характеристики фотосинтетичних пігментів визначали за оптичними властивостями листка, використовуючи методики аналізу спектрів відбиття–поглинання [4, 10], що дає можливість реєструвати на різних довжинах хвиль відбиття пігментів спектрів хлорофілів. У варіанті інокульованої сої зареєстровано зростання кривої спектра і збільшення показника хлорофілу *a* на 18,5%, а хлорофілу *b* — на 14,2% (рис. 4).

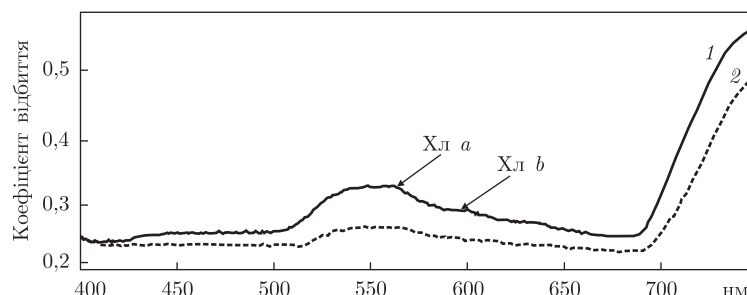


Рис. 4. Спектри відбиття поверхні листкової пластинки рослин сої. 1 — інокуляція *B. japonicum* штаму УМК В-6035, 2 — без інокуляції. Стрілками показано піки проявлення хлорофілів

Таким чином, нами встановлено зростання чисельності мікрофлори на поверхні кореня і в ризосфері сої, інокульованої *B. japonicum* УМК В-6035. Морфологічна пластичність мезофілу листків інокульованих рослин виявлялася у збільшенні таких показників, як: ширина мезофілу, площа клітин мезофілу, коефіцієнт палісадності, частка хлоропластів від загальної площі мезофілу та об'єму фотомембран, що підтверджувалося підвищенням піків хлорофілів у спектрограмах поглинання-відбиття.

1. Антипчук А. Ф., Канцелярук Р. М., Рангелова В. М. и др. Связь между фотоассимиляционной активностью бобовых растений и их симбиотической азотфиксацией // Микробиол. журн. – 1990. – **52**, № 6. – С. 49–53.
2. Коць С. Я., Маліченко С. М., Кругова О. Д. та ін. Фізіолого-біохімічні особливості живлення рослин біологічним азотом. – Київ: Логос, 2001. – 271 с.
3. Коць С. Я., Береговенко С. К., Кириченко Н. В., Мельникова Н. Н. Особенности взаимодействия растений и азотфиксирующих микроорганизмов. – Киев: Наук. думка, 2007. – 314 с.
4. Zang H., Prithviraj B., Souleimanov A. et al. The effect of temperature and genestein concentration on lipo-chitoooligosaccharide (LCO) production by wild-type and mutant strains of *Bradyrhizobium japonicum* // Soil Biol. and Biochem. – 2002. – **34**. – P. 1175–1180.
5. Khan W. M., Prithviraj B., Smith D. L. Photosynthetic responses of corn and soybean to foliar application of salicylates // J. Plant Phys. – 2003. – **160**. – P. 485–492.
6. Rawsthorne E. S., Minchin F. R., Summerfield R. J. Carbon and nitrogen metabolism in legume root nodules // Phytochemistry. – 1980. – **19**. – P. 341–355.
7. Береговенко С. К. Інтенсивність фотосинтетичних процесів різних сортів сої залежно від інокуляції ефективними штамми *Bradyrhizobium japonicum* // Наук. зап. Тернопіл. пед. ун-ту ім. Володимира Гнатюка. Сер. Біологія. – 2003. – **2**, № 21. – С. 19–23.
8. Луцук А. Д., Дедюк Е. С., Луцук М. Д. Лектины в гистохимии. – Львов: Выща шк., 1989. – 144 с.
9. Vegna S. H., Dwyer D., Cloutier L. et al. Decoupling of light intensity effects on the growth (biomass increase) and development of C3 and C4 weed // J. Exp. Bot. – 2002. – **53**. – P. 1935–1940.
10. Smith K. L., Steven M. D., Colls J. J. Use of hyperspectral derivative ratios in the red-edge region to identify plant stress responses to gas leaks // Remote Sens. Environ. – 2004. – **92**. – P. 207–217.
11. Иутинская Г. А., Пономаренко С. П., Андреев Е. И. и др. Биорегуляция микробно-растительных систем / Под общей ред. Г. А. Иутинской, С. П. Пономаренко. – Киев: Ничлава, 2010. – 464 с.
12. Кочубей С. М. Организация фотосинтетического аппарата высших растений. – Киев: Альтерпрес, 2001. – 204 с.

Інститут мікробіології і вірусології
ім. Д. К. Заболотного НАН України, Київ
Інститут космічних досліджень НАН України
та Державного космічного агентства України, Київ

Надійшло до редакції 16.08.2013

Н. И. Адамчук-Чалая, В. А. Яценко,
член-корреспондент НАН Украины **Г. А. Иутинская**

Влияние инокуляции *Bradyrhizobium japonicum* УКМ В-6035 на фотосинтетический аппарат сои

Исследовали архитектуру микробного ценоза корневой зоны инокулированной клубеньковыми бактериями трансгенной сои, выращенной в полевых условиях при параллельном мониторинге морфофункционального состояния фотосинтетического аппарата растений методами электронной микроскопии и дистанционной спектрофотометрии. Выявлено увеличение количества бактерий на поверхности главного корня и в ризосфере инокулированной сои по сравнению с растениями без бактериализации. Морфометрические исследования палисадного мезофилла инокулированных растений выявили статистически значимое увеличение ширины мезофилла, площади клеток мезофилла, коэффициента палисадности, коэффициента пластичности, доли хлоропластов от общей площади мезофилла сравнительно с неинокулированными. Морфологические изменения развития фотомембран подтверждались спектрометрическими измерениями главных пигментов пластинки листа.

N. I. Adamchuk-Chala, V. A. Yacenko,
Corresponding Member of the NAS of Ukraine **G. O. Iutynska**

Influence of *Bradyrhizobium japonicum* UKM B-6035 inoculation on the soybean photosynthetic apparatus

The architectonics of microcenosis of field-grown transgenic soybean plants inoculated by nodule bacteria with parallel monitoring of the morphology and the functional organization of a plant photosynthetic apparatus by methods of electron microscopy and remote spectrophotometry is investigated. The increase of the bacteria number on the surface of main root and rhizosphere is determined in inoculated soybean plants. The palisade mesophyll morphometric investigation has confirmed the statistically essential increase of the mesophyll width the area of mesophyll cells, coefficient of palisade, coefficient of plasticity, and a part of chloroplasts in the summary mesophyll are in comparison with those of uninoculated plants. Morphological changes in photomembrane development are confirmed in spectrophotometrical estimations of main pigments in a leaf blade.

А. Д. Куликова, Т. И. Андреевко, А. А. Солдатов

Цветовой полиморфизм раковины и активность аминотрансфераз тканей *Mytilus galloprovincialis* Lam.

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины Г. Е. Шульманом)

*Методом фотографирования и цифровой обработки снимков раковин однозначно идентифицированы четыре цветовые группы *Mytilus galloprovincialis*: черные, переходные, темно-коричневые, светло-коричневые. Между ними отмечены существенные отличия в активности аланин- и аспаратаминотрансфераз, задействованных в процессах анаэробного метаболизма. Наибольшие расхождения (1,5–2,8 раза) выявлены между крайними группами: с черной и светло-коричневой окраской раковины. Допускается, что они могут быть связаны с адаптацией моллюсков к условиям скальных и донных экотопов.*

Двустворчатый моллюск *Mytilus galloprovincialis* Lam. является массовым для черноморского региона, его поселения отмечаются на иловых и скальных субстратах, принципиально отличающихся по условиям абиотического окружения [1]. Для иловых поселений характерно преобладание моллюсков со светло-коричневой окраской раковины, для скальных — с окраской черно-фиолетового цвета [1, 2].

Разделение мидий на цветовые группы, как правило, производится визуально. Количество выделяемых фенотипов варьирует. Отсутствие единого критерия, применяемого для дифференциации цветовых морф, затрудняет исследования. В последнее время для описания интенсивности и характера окраски биологических объектов широкое применение получил метод цифровой обработки фотографий. Он позволяет описать цвет количественно [3]. На этой основе нами была разработана новая методика дифференциации цветовых морф мидии [4].

Считается, что окраска створок мидий генетически детерминирована. Об этом свидетельствуют распределение фенотипов в популяции [5] и результаты гибридологического анализа [6]. Однако схема наследования данного признака, обсуждаемая в ряде работ, окончательно не принята [5–7].

Сравнительная оценка абиотических условий скальных и иловых биотопов позволяет предположить, что основным фактором, определяющим направление действия естественного отбора, является содержание кислорода в морской среде. Отсюда следует, что поиск различий на популяционном уровне должен быть сосредоточен на молекулярных системах, ответственных за толерантность моллюска к условиям гипоксии и аноксии.

Аспаратаминотрансфераза (АСТ, КФ 2.6.1.1) и аланинаминотрансфераза (АЛТ, К.Ф.2.6.1.2) — эндогенные ферменты класса трансфераз. АСТ определяет устойчивость моллюсков к экстремальным формам гипоксии и аноксии, так как сопрягает процессы белкового и углеводного обменов (аспартат-сукцилатное направление метаболизма) [8]. АЛТ контролирует сукцилаттиокиназную реакцию [9], направленную на образование в процессе гликолиза менее токсичных метаболитов [10].

Для АСТ принята шестиаллельная схема наследования, объясняющая высокое фенотипическое разнообразие [11]. Она допускает существование 21 возможного варианта генотипа, из которых 13 обнаружено экспериментально [11]. Отсюда следует, что система АСТ

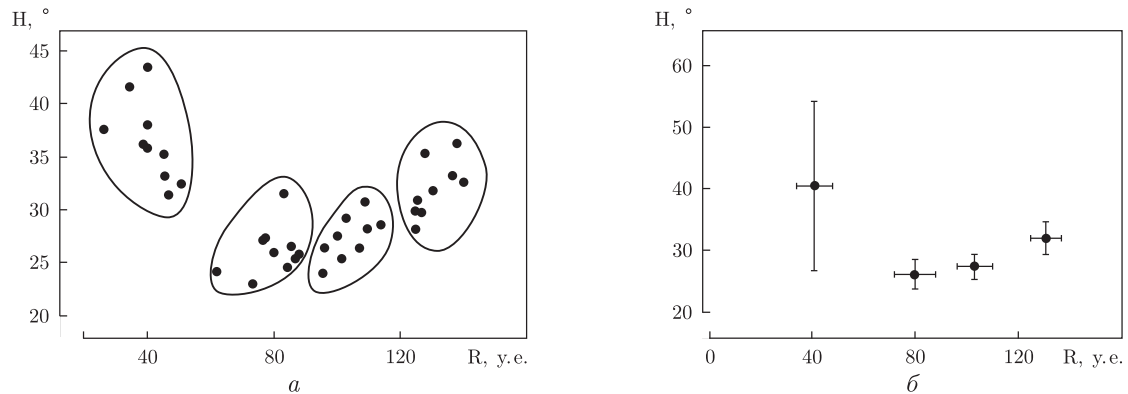


Рис. 1. Распределение цветовых характеристик створок раковин *M. galloprovincialis* в системе координат Red-Hue (Adobe Photoshop CS-3): *a* — полигон распределения; *б* — результаты статистической обработки, $\bar{x} \pm S_x$

может являться удобной моделью для изучения популяционной структуры *M. galloprovincialis*. Относительно АЛТ такая информация отсутствует.

Цель настоящей работы — сравнить активность АСТ и АЛТ в тканях четырех цветовых групп *M. galloprovincialis*, выявленных на основе цифровой обработки фотографий створок моллюска.

Объектом исследований служили половозрелые особи моллюска *M. galloprovincialis* (семейство Mytilidae) обоего пола с различным характером пигментации створок. Длина раковины составляла 42–75 мм. Характер окраски раковин моллюсков оценивали, используя метод фотографирования и цифровой обработки снимков раковин в системе координат Red-Hue (Adobe Photoshop CS-3) [4].

Мягкие ткани моллюсков (жабры, нога) препарировали при 0–4 °С. Полученные образцы хранили при –27...–28 °С в морозильной камере (“Liebherr-Comfort”, Германия). Гомогенаты готовили непосредственно в день эксперимента. В качестве трансформирующей среды использовали 1,15% раствор KCl.

Активность АСТ и АЛТ определяли с помощью унифицированного динитрофенилгидразинового метода Райтмана–Френкеля [12] при 25 °С. В работе использовали стандартный набор реактивов: “Simco, Ltd” (Украина). Содержание белка в пробах контролировали по методу Лоури.

Дифференциация цветовых морф. При отработке метода фотографирования и цифровой обработки снимков раковин в качестве показательной характеристики было выбрано значение красного компонента (Red) [4]. Полигон распределения, построенный в системе координат Red-Hue (красный цвет — тон), позволяет выделить четыре относительно изолированных скопления точек (рис. 1, *a*). Их обозначили как: черная (Red — 37,2–61,8 у. е.), переходная (Red — 71,6–89,6 у. е.), темно-коричневая (Red — 91,2–126,0 у. е.) и светло-коричневая (Red — 130,8–146,0 у. е.). Статистическая обработка цифровых массивов показала, что между этими цветовыми группами (по Red) существуют достоверные различия на уровне смежных скоплений точек при $p < 0,001$ (см. рис. 1, *б*).

Активность АСТ. Активность АСТ варьировала от 0,02 до 0,234 мкмоль пирувата \times \times мин^{–1}·мг^{–1} белка. Наблюдалась ее выраженная зависимость от цвета раковины моллюска (рис. 2, *a*). Для ноги ее можно описать уравнением линейной регрессии при высоких значениях R^2 (0,967). Максимальные величины отмечены у особей со светло-коричневой окрас-

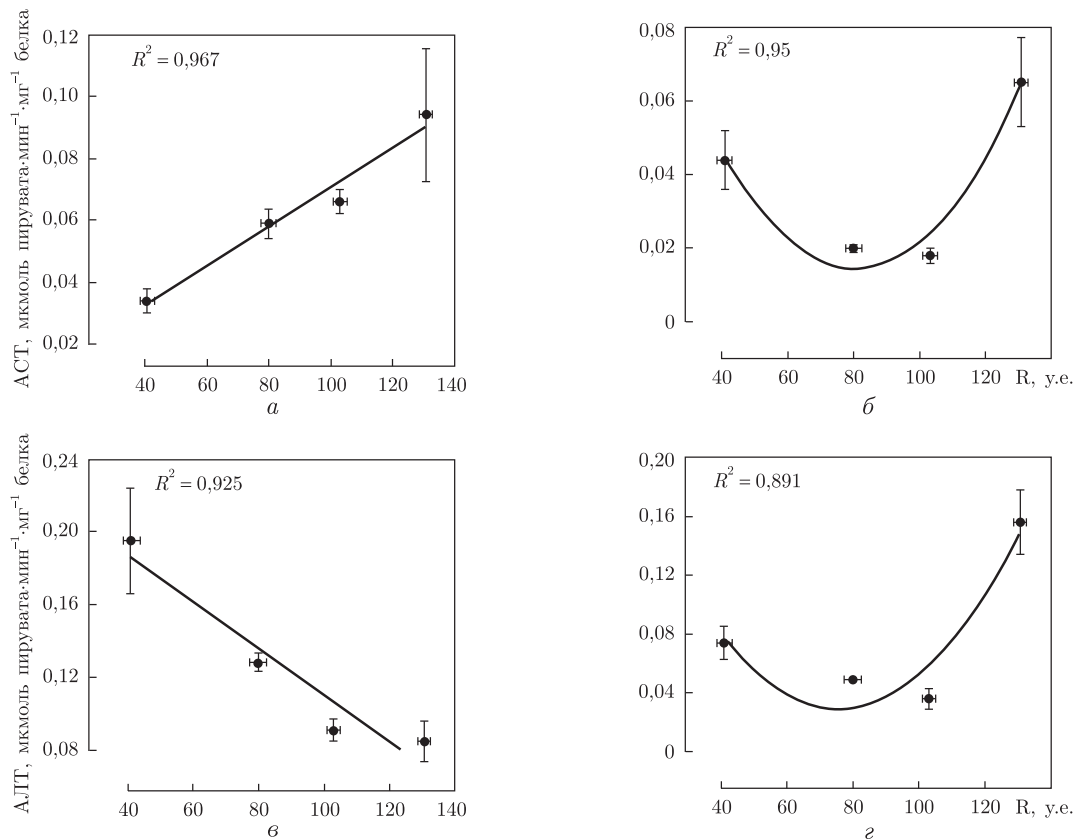


Рис. 2. Зависимость активности трансаминаз в тканях *M. galloprovincialis* от цветовых характеристик ее раковины: а — активность АСТ в ноге; б — активность АСТ в жабрах; в — активность АЛТ в ноге, г — активность АЛТ в жабрах; R — Red

кой раковины ($0,094 \pm 0,021$ $\mu\text{mol} \cdot \text{min}^{-1} \cdot \text{mg}^{-1}$ белка), а минимальные — с раковиной черной окраски. Различия составили 2,8 раза ($p < 0,001$).

Близкие результаты получены и в отношении жабр (см. рис. 2, б). У моллюсков со светло-коричневой окраской раковины активность АСТ составила $0,065 \pm 0,012$ $\mu\text{mol} \cdot \text{min}^{-1} \cdot \text{mg}^{-1}$ белка. Это почти на 50% выше, чем у особей с черной окраской створок ($p < 0,05$), и более чем в 3 раза выше, чем у особей с переходной и темно-коричневой окраской раковин ($p < 0,001$). При этом зависимость лучше описывалась уравнением параболической функции.

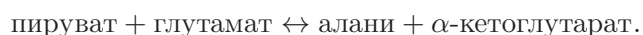
Как уже отмечалось, АСТ определяет аспартат-сукцинатное направление метаболизма [8], позволяющее получать дополнительный к гликолитическому ресурс макроэргов в условиях экстремальных форм гипоксии и аноксии. Высокая активность АСТ у особей со светло-коричневой окраской раковины, вероятно, связана с особенностями условий обитания данной цветовой группы *M. galloprovincialis*. Эти моллюски чаще встречаются в донных сообществах, где отсутствует активная циркуляция в водной толще и наблюдается внешний дефицит кислорода. Моллюски с черной окраской раковины, напротив, преобладают в скальных биотопах, часто приуроченных к прибойной зоне, где возникновение гипоксии невозможно. В этом, по-видимому, состоит основная причина обнаруженных различий в активностях АСТ.

Активность АЛТ. Значение активности АЛТ в ноге варьировало от 0,038 до 0,42 мкмоль пирувата \times мин⁻¹ \cdot мг⁻¹ белка (см. рис. 2, в), уменьшаясь по направлению от черных моллюсков к светлоокрашенным. Зависимость активности от пигментации раковины можно описать уравнением линейной регрессии ($R^2 = 0,925$). Практически между всеми цветовыми группами наблюдались достоверные отличия ($p < 0,01$). Активность АЛТ в группе моллюсков с черной окраской в 2,3 раза превышала таковую в группах с коричневой окраской.

В жабрах характер распределения активностей среди цветовых групп напоминал таковой для АСТ и описывался параболической функцией (см. рис. 2, г). В этих тканях обе крайние группы имели достоверно более высокое значение активности, чем моллюски промежуточной окраски. Самая высокая активность АЛТ зафиксирована у светло-коричневых особей, она превышала показатели группы с черной окраской в 2,1 раза ($p < 0,005$), с темно-коричневой и переходной — в 3,5–4,0 раза ($p < 0,001$). Меньшая активность наблюдалась у мидий с черной окраской створок, она превышала промежуточные группы приблизительно в два раза ($p < 0,05$).

Изначально предполагалось, что более приспособленная к аноксии коричневая морфа должна иметь высокую активность АЛТ. Однако в ноге наблюдалась прямо противоположная ситуация. У взрослых моллюсков в основании данного органа располагается железа, секреторная биссус — образование, позволяющее мидии прикрепляться к субстрату. Известно, что для черной морфы характерна большая интенсивность синтеза биссусной нити [5]. По-видимому, это связано со спецификой местообитания — темноокрашенные моллюски образуют поселения на скалистом субстрате [1]. Подверженные волновой нагрузке, они нуждаются в прочном прикреплении к поверхности и постоянном продуцировании новых нитей взамен поврежденных.

Адгезивный белок биссуса считается полифенольным: для него характерно высокое содержание фенилсодержащих аминокислот (~19% тирозина и дигидроксифенилаланина) [13, 14]. Кроме того, 6,8% составляет аланин и 19% — пролин. Обе эти аминокислоты — заменимые. Наиболее распространенный способ биосинтеза аланина — переаминирование пирувата. Реакция катализируется АЛТ, при этом запас пирувата постоянно пополняется:



Пролин синтезируется из глутамата в ходе нескольких последовательных реакций [15]. Глутамат отсутствует в первичной последовательности биссуса, однако он необходим как источник для восстановления запаса свободного пролина. Существует до пяти известных путей синтеза глутаминовой кислоты, по меньшей мере два из них используют α -кетоглутарат. На стадии α -кетоглутаровой кислоты в цикле Кребса она может выводиться из круга с превращением ее в L-глутаминовую кислоту.

Первый способ синтеза глутамата, реакция обратимого переаминирования, представлена выше. Коэффициент АЛТ близок к единице, поэтому реакция может протекать в обоих направлениях. Однако такой способ пополнения пула глутамата мало вероятен — в этом случае происходит накопление пирувата и не синтезируется аланин.

Второй путь синтеза глутамата из α -кетоглутарата контролируется ферментом глутаматдегидрогеназой:



Активное переаминирование пирувата увеличивает в ткани запас аланина и α -кетоглутарата, который в ходе ряда последовательных ферментативных реакций становится источником биосинтеза пролина.

Вероятно, специфика метаболизма в ноге мидий в первую очередь направлена на продукцию биссусной нити. В таком случае высокая активность АЛТ у черной морфы связана не с нейтрализацией метаболитов гликолиза, а с пополнением пула свободных аминокислот (пролина и аланина).

Таким образом, применение метода фотографирования и цифровой обработки снимков раковин позволило однозначно идентифицировать четыре цветовые группы *M. galloprovincialis*: черные, переходные, темно-коричневые, светло-коричневые. Между ними отмечены существенные отличия в активности АСТ и АЛТ, задействованных в процессах анаэробного метаболизма. Наибольшие расхождения выявлены между краевыми группами: с черной и светло-коричневой окраской раковины. Допускается, что они могут быть связаны с адаптацией моллюсков к условиям скальных и донных экотопов.

1. Иванов В. Н., Холодов В. И., Сеничева М. И. и др. Биология культивируемых мидий. – Киев: Наук. думка, 1989. – 99 с.
2. Казанкова И. И. Частота цветовых морф в поселениях *Mytilus galloprovincialis* в прибрежных водах южного и юго-западного Крыма // Экология моря. – 2008. – **75**. – С. 38–41.
3. Козминский Е. В., Лезин П. А. Методика цветовых измерений элементов окраски раковины у брюхоногих моллюсков // Биология моря. – 2006. – **32**, № 5. – С. 371–373.
4. Куликова А. Д. Выявления цветовых морф моллюска *Mytilus galloprovincialis* Lam. с использованием компьютерной обработки фотографий // Мор. экол. журн. – 2012. – **11**, № 3. – С. 63–67.
5. Булатов К. В. Генетическая природа окраски раковин у черноморской мидии *Mytilus galloprovincialis* Lam. // Докл. АН УССР. Сер. Б. – 1984. – № 6. – С. 53–55.
6. Столбова Н. Г., Пиркова А. В., Ладыгина Л. В. Наследование цвета раковины у мидии *Mytilus galloprovincialis* Lam. // Цитология и генетика. – 1996. – **30**, № 6. – С. 62–65.
7. Шурова Н. М., Золотарев В. Н. Анализ фенотипической структуры поселений мидий *Mytilus galloprovincialis* Черного моря по окраске наружного призматического слоя их раковин // Мор. экол. журн. – 2008. – **7**, № 4. – С. 88–97.
8. Hochachka P. W., Fields J., Mustafa T. Animal life without oxygen: basic biochemical mechanisms // Am. Zool. – 1973. – **13**. – P. 543–555.
9. Mommsen Th. P., French C. J., Hochachka P. W. Sites and patterns of protein and amino acid utilization during spawning migration of salmon // Can. J. Zool. – 1980. – **58**. – P. 1785–1799.
10. Kluytmans J. H., Zandee D. I. Comparative study of the formation and excretion of anaerobic fermentation products in bivalves and gastropods // Comp. Biochem. Physiol. B: Biochem. Mol. Biol. – 1983. – **75**, No 4. – P. 72–732.
11. Johnson A. G., Utter F. M. Electrophoretic variants of aspartate aminotransferase of the bay mussel, *Mytilus edulis* (Linnaeus, 1758) // Comp. Biochem. Physiol. B: Biochem. – 1973. – **44**. – P. 317–323.
12. Камышников В. С. Справочник по клинико-биохимическим исследованиям и лабораторной диагностике. – Москва: МЕДпресс-информ, 2004. – 501 с.
13. Waite J. H., Tanzer M. L. Polyphenolic substances of *Mytilus edulis* // Science. – 1981. – **212**. – P. 1038–1040.
14. Inoue K., Othe S. Adhesive protein cDNA of *Mytilus galloprovincialis* encodes decapeptide repeats but no hexapeptide motif // Biol. Bull. – 1994. – **186**. – P. 349–355.
15. Lehninger A. L., Nelson D. L., Cox M. M. Principles of Biochemistry. – 3rd ed. – New York: Worth Publishers, 1993. – 729 p.

А. Д. Кулікова, Т. І. Андреєнко, О. О. Солдатов

Колірний поліморфізм мушлі і активність амінотрансфераз тканин *Mytilus galloprovincialis* Lam.

*Методом фотографування і цифрової обробки знімків мушель однозначно ідентифіковано чотири колірні групи *Mytilus galloprovincialis*: чорні, перехідні, темно-коричневі, світло-коричневі. Між ними відмічено істотні відмінності в активності аланін- і аспаратамінотрансфераз, задіяних у процесах анаеробного метаболізму. Найбільші розбіжності (1,5–2,8 раза) виявлені між крайовими групами: з чорним і світло-коричневим забарвленням мушлі. Допускається, що вони можуть бути пов'язані з адаптацією молюсків до умов скельних і донних екотонів.*

A. D. Kulikova, T. I. Andreenko, A. A. Soldatov

Color polymorphism of a shell and the aminotranferase activity in *Mytilus galloprovincialis* Lam. tissues

*Using the method of digital photo processing, four color groups of *Mytilus galloprovincialis* are determined: black, intermediate, dark and light brown. The activities of alanine and aspartate aminotransferases taking part in processes of anaerobic metabolism between groups are significantly different. The highest divergence (1.5–2.8 times) was observed between the edge groups with black and light brown shell color. This is apparently related to mussel's adaptation to environmental conditions of rocky shores and seabed ecotops.*

І. О. Проценко, член-кореспондент НАН України Д. М. Говорун
Конформаційні властивості молекули кверцетину:
квантово-хімічне дослідження

На рівні теорії MP2/6-311++G(d,p)//DFT B3LYP/6-31G(d,p) вперше показано, що молекула кверцетину має 12 стійких планарних конформерів, відносна енергія Гіббса яких знаходиться в діапазоні 0–5,4 ккал/моль за нормальних умов. Наведено рівноважні геометричні характеристики для основного (енергетично найвигіднішого) конформера. Встановлено, що при переході в кристалічний стан молекула кверцетину значно деформується, набуваючи неплоскої будови.

Кверцетин — біологічно активна сполука, що належить до класу біофлаваноїдів. Він відіграє важливу роль у метаболізмі багатьох рослин, зокрема таких, як цибуля, часник, кмин, морква, чорниця та ін. [1].

Кверцетин широко використовується в медицині та фармації для профілактики і лікування деяких онкологічних захворювань [2]. Він, зокрема, стримує ріст лейкемії та раку молочної залози [3]. Як і інші біофлаваноїди, захищає серцево-судинну систему від шкідливого впливу холестерину, навіть краще, ніж вітамін Е, зміцнює стінки судин. Він також сприяє утворенню в організмі людини кортизону — гормону синтезу вуглеводнів [4].

Кверцетин через погану розчинність у воді [5] зазвичай використовують у медицині в кристалічному стані (гранули в таблетках). Постає надзвичайно важливе з біологічної та медичної точки зору питання — які фізико-хімічні властивості молекули кверцетину забезпечують її поліфункціональність?

Відповідь на поставлене питання може міститися в аналізі конформаційних властивостей цієї молекули. Беручи до уваги просторову будову кверцетину [6] та враховуючи кількість одинарних хімічних зв'язків, відносно яких можливе загальмоване обертання на кут 180° її структурних фрагментів, неважко отримати максимально можливу кількість конформерів — 64. Можна припустити, що кожна із цих 64 можливих конформацій кверцетину як біологічно активної сполуки відповідає за ту чи іншу її поліфункціональну властивість.

Ми ставили за мету дослідити конформаційні властивості молекули кверцетину у вільному стані новітніми методами квантової хімії. Результати таких досліджень дадуть можливість відповісти на вищезгадане біологічно важливе питання.

Методи дослідження. Розрахунки проводили на рівні теорії MP2/6-311++G(d,p)//DFT B3LYP/6-31G(d,p) без будь-яких структурних обмежень. Належність тієї чи іншої конформації до одного з локальних мінімумів на гіперповерхні потенціальної енергії контролювали за відсутністю уявних частот у їхніх коливальних спектрах, які розраховували в гармонійному наближенні. Початкову геометрію молекули кверцетину задавали, використовуючи результати роботи [7, 8]. Відносна енергія Гіббса отриманих конформерів кверцетину відповідає нормальним умовам. Розрахунки проводили за допомогою програмного пакета Gaussian 03 [9].

Результати та їхнє обговорення. Аналіз отриманих результатів (рис. 1, 2) дозволяє дійти таких висновків. Нами вперше показано, що молекула кверцетину має 12 стійких кон-

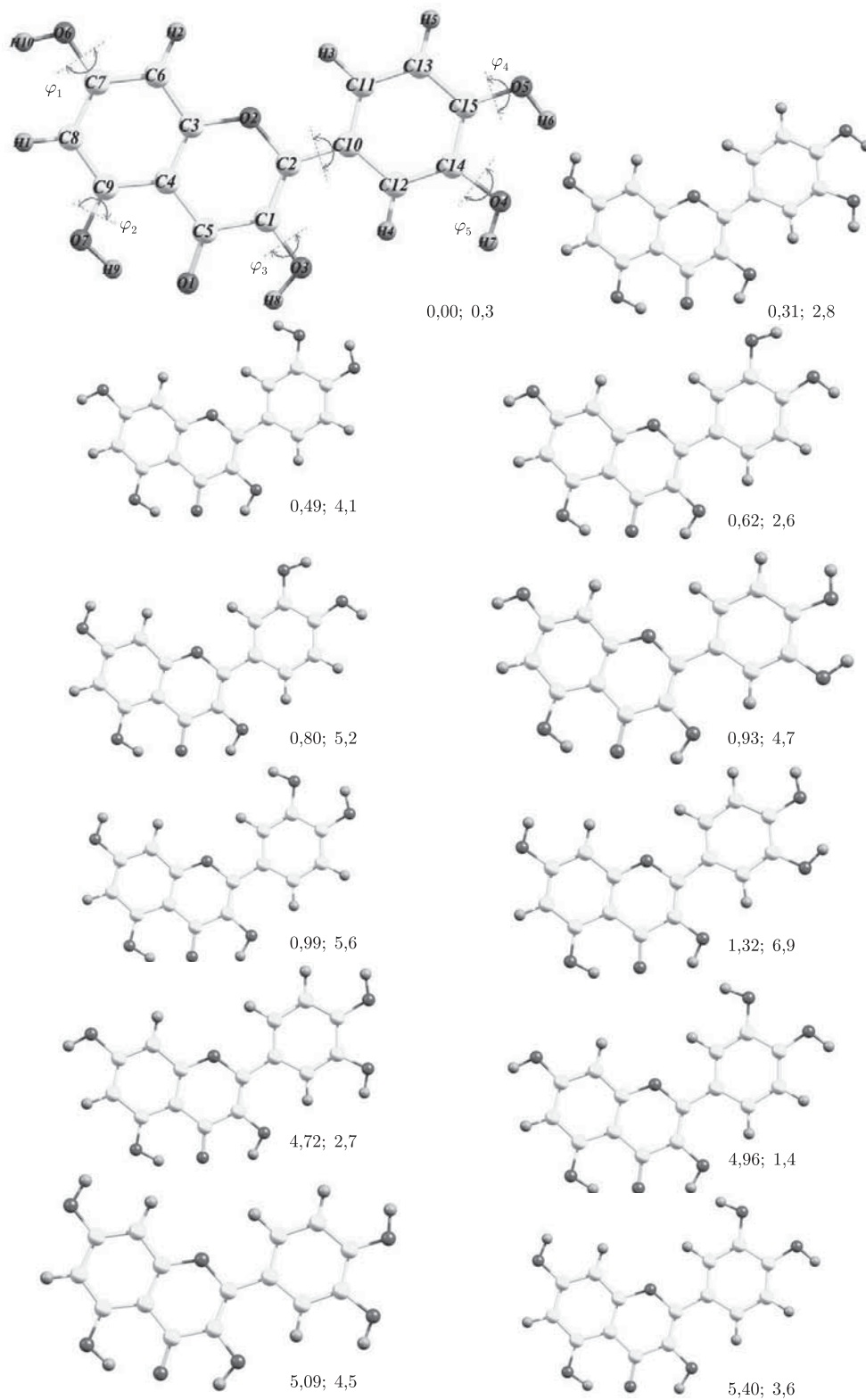


Рис. 1. Усі можливі конформації молекули кверцетину у вільному стані. Перше число біля кожного конформаера — відносна енергія Гіббса у ккал/моль, друге значення — дипольний момент у дебаях

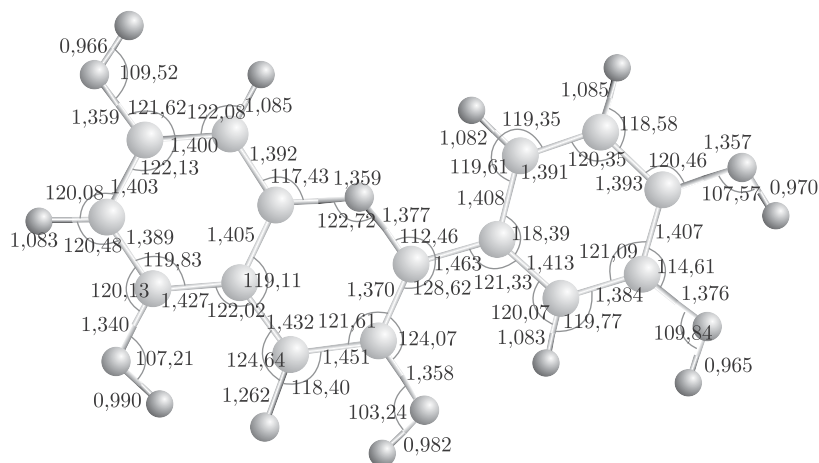


Рис. 2. Структурні характеристики енергетично найвигіднішого конформера молекули кверцетину. Довжини хімічних зв'язків наведено в Å, а значення валентних кутів — у градусах

формерів, відносна енергія Гіббса яких лежить у діапазоні 0–5,4 ккал/моль. Усі без винятку конформери є полярними структурами — їхні дипольні моменти змінюються від 0,3 D (це величина для енергетично найвигіднішого конформера, рівноважні геометричні характеристики якого подано на рис. 2) до 6,9 D. Усі без винятку конформери — планарні структури із симетрією C_s — кутове відхилення атомів від площини не перевищує 0,1 град. Цікаво, що всі конформери мають однакову будову структурного фрагмента, що включає карбонільну групу $C=O$ та дві сусідні гідроксильні групи OH , повернуті атомами водню до останньої. Це може вказувати на наявність у цьому фрагменті двох внутрішньомолекулярних H -зв'язків, які біфуркують на спільний карбонільний атом кисню (це питання ми плануємо детально висвітлити в подальшому). Становить інтерес також, що сусідні гідроксильні групи у шестичленному кінці молекули можуть набувати як цис-, так і транс-орієнтації одна відносно одної, причому остання ситуація реалізується в тих конформерах, які мають вищу енергію порівняно з енергією конформерів, де трактується перша ситуація. Причиною цього є, ймовірно, відштовхування вільних електронних пар сусідніх атомів кисню гідроксильних груп у другому випадку (транс-орієнтація) та можлива наявність внутрішньомолекулярного H -зв'язку $OH...O$ у першому випадку.

Цікаво порівняти отримані нами результати з даними рентгеноструктурних досліджень [10]. Виявляється, що при переході з вільного стану в кристалічній молекула кверцетину сильно деформується: вона стає непласкою (двогранний кут між фенільним кільцем і гетерокільцем $C_1-C_2-C_{10}-C_{11}$ становить $47,8^\circ$) при цьому всі гідроксильні групи виходять із площини своїх кілець: $C_6-C_7-O_6-H_{10}$, $C_8-C_9-O_7-H_9$, $C_2-C_1-O_3-H_8$ в гетерокільці та $C_{13}-C_{15}-O_5-H_6$, $C_{15}-C_{14}-O_4-H_7$ у фенільному кільці (див. рис. 1). Це зумовлено, з одного боку, структурною міцністю молекули, а з іншого — наявністю сил кристалічного пакування, зокрема міжмолекулярних H -зв'язків. Конформація молекули в кристалічному стані найбільше схожа на конформер з відносною енергією Гіббса 0,49 ккал/моль. Для підтвердження цього ми використали модель [11] кверцетину в кристалі і оптимізували цю геометрію без фіксації кутів, які є індикаторами, що відрізняють молекулу кверцетину в кристалі від кверцетину у вакуумі. Після чого оптимізована структура була вже планарною, і порівнявши її з 12-ма досліджуваними конформерами (див. рис. 1), ми віднайшли ту

конформацію, яка і відповідала молекулі кверцетину в кристалі. Саме геометрія конформера з відносною енергією Гіббса 0,49 ккал/моль і відповідає кверцетину в кристалічному стані. Це означає, що рентгеноструктурний аналіз не дає можливості отримати просторову будову кверцетину, притаманну його вільному стану.

На рівні теорії MP2/6-311++G(d,p)//DFT B3LYP/6-31G(d,p) вперше показано, що молекула кверцетину має 12 стійких планарних конформерів, відносна енергія Гіббса яких знаходиться в діапазоні 0–5,4 ккал/моль за нормальних умов. Наведено рівноважні геометричні характеристики для основного (енергетично найвигіднішого) конформера. Встановлено, що при переході в кристалічний стан молекула кверцетину значно деформується, набуваючи неплоскої будови.

Автори висловлюють вдячність корпорації “GAUSSIAN” (США) за наданий Д. М. Говоруну грант — програмний пакет “GAUSSIAN03” для платформи Win32.

1. *Williamson G., Manach C.* Bioavailability and bioefficacy of polyphenols in humans. II. Review of 93 intervention studies // *Am. J. Clin. Nutr.* – 2005. – **81**. – P. 243–255.
2. *Boots A. W., Haenen G. R., Bast A.* Health effects of quercetin: from antioxidant to nutraceutical // *Eur. J. Pharmacol.* – 2008. – **582**, No 2–3. – P. 325–337.
3. *Lamson D. W., Brignall M. S.* Antioxidants and cancer III: quercetin // *Alt. Med. Rev.* – 2000. – **5**, No 3. – P. 196–208.
4. *Egert S., Bosy-Westphal A., Seiberl J. et al.* Quercetin reduces systolic blood pressure and plasma oxidized low-density lipoprotein concentrations in overweight subjects with a high-cardiovascular disease risk phenotype: a double-blinded, placebo-controlled cross-over study // *Br. J. Nutr.* – 2009. – **102**, No 7. – P. 1065–1074.
5. *Smith A. J., Kavuru P., Wojtas L. et al.* Cocrystals of quercetin with improved solubility and oral bioavailability // *Mol. Pharm.* – 2011. – **8**, No 5. – P. 1867–1876.
6. *Protein data bank: PDB Chemical Component QUE.* – <http://www.pdb.org/pdb/ligand/ligandsummary.do?hetId=QUE&sid=1H11/>.
7. *Protsenko I. O., Bulavin L. A., Hovorun D. M.* Investigation of structural properties of quercetin by quantum chemistry methods // *WDS'10 Proc. Contributed Papers.* – 2010. – Pt 3. – P. 51–54.
8. *Богдан Т. В., Тригубенко С. А., Говорун Д. М. та ін.* Конформаційний аналіз молекули кверцетину // *Наук. зап. НаУКМА.* – 2001. – **19**. – С. 465–460.
9. *Gaussian 03, Revision C. 02* / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, Jr., J. A. Montgomery, T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, J. M. Millam, S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J. E. Knox, H. P. Hratchian, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, P. Y. Ayala, K. Morokuma, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, V. G. Zakrzewski, S. Dapprich, A. D. Daniels, M. C. Strain, O. Farkas, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A. G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, C. Gonzalez, J. A. Pople. – Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.
10. *Rossi M., Rickles L. F., Halpin W. A.* The crystal and molecular structure of quercetin: A biologically active and naturally occurring flavonoid // *Bioorgan. Chem.* – 1986. – **14**, No 1. – P. 55–69.
11. *Protein data bank: PDB Chemical Component QUE.* – <http://ligand-expo.rcsb.org/reports/Q/QUE>.

И. А. Проценко, член-корреспондент НАН Украины Д. Н. Говорун

**Конформационные свойства молекулы кверцетина:
квантово-химическое исследование**

На уровне теории MP2/6-311++G(d,p)//DFT B3LYP/6-31G(d,p) впервые показано, что молекула кверцетина имеет 12 устойчивых планарных конформаций, относительная энергия Гиббса которых находится в диапазоне 0–5,4 ккал/моль при нормальных условиях. Приведены равновесные геометрические характеристики для основного (энергетически выгодного) конформера. Установлено, что при переходе в кристаллическое состояние молекула кверцетина существенно деформируется, приобретая вид неплоской структуры.

I. O. Protsenko, Corresponding Member of the NAS of Ukraine D. M. Hovorun

**Conformational properties of quercetin: quantum chemistry
investigation**

The conformational analysis performed at the MP2/6-311++G(d,p)//DFT B3LYP/6-31G(d,p) theory level reveals as many as 12 conformations of a quercetin molecule with relative Gibbs energies from 0 to 5.4 kcal/mole. The spatial structure of the most energetically favorable conformation and its geometric characteristics have been found. It is found that a molecule of quercetin in the crystal state becomes much deformed to a nonplanar structure.



УДК 577.218:577.29

А. С. Секан, С. В. Ісаєнков

Одноетапне отримання трансформантів *Arabidopsis thaliana*, вільних від маркерних послідовностей, за допомогою сайт-специфічної рекомбіназної системи Cre/loxP під контролем мінімального 35S промотору

(Представлено академіком НАН України Я. Б. Блюмом)

У ряді публікацій описано використання сайт-специфічної рекомбіназної системи Cre/loxP під контролем тканиноспецифічних промоторів для отримання трансформантів, вільних від селективних маркерних генів (СМГ). Недоліком в даному випадку є створення специфічних умов для проведення трансформації або залучення додаткових агентів для ініціації експресії рекомбінази. Нами було розроблено новий підхід до використання сайт-специфічної рекомбіназної системи Cre/loxP для отримання генетично модифікованих рослин, вільних від СМГ, та встановлено ефективність роботи рекомбінази Cre у наступному поколінні трансформованих рослин *A. thaliana*.

Стрімкий розвиток генетичної інженерії рослин протягом останніх десятиліть забезпечує підґрунтя для створення широкого спектра генетично модифікованих (ГМ) рослин, зокрема з покращеними сільськогосподарськими ознаками. Технології, що використовуються для створення таких рослин, дають змогу введення все більш широкого кола генів інтересу в рослинний геном. Але при цьому під час процесу трансформації разом з геном інтересу привносяться й самі різноманітні маркерні гени (селективні маркерні гени (СМГ)), яких на сьогодні налічується більше ніж 50 [1]. До них належать гени стійкості до антибіотиків та гербіцидів [2, 3]. Використання таких генів дозволяє проводити селекційний добір трансформованих клітин або тканин на етапі регенерації. Після завершення добору трансформованого матеріалу необхідність в експресії селективних маркерних генів відпадає. Проте під час подальшого практичного використання ГМ рослин виникає загроза потрапляння СМГ від трансформантів до дикорослих родичів, що може спричинити виникнення нащадків з небажаними ознаками. Існують також застереження щодо можливості горизонтального перенесення генів. Тому розроблення генетично інженерних методів, за допомогою яких

© А. С. Секан, С. В. Ісаєнков, 2014

гарантовано можна уникнути такого розвитку подій, дозволило б розв'язати ряд проблем, пов'язаних з комерціалізацією ГМ рослин [4].

На сьогодні технологія сайт-специфічних рекомбіназних систем, яка є перспективною в цьому відношенні, набуває все більш широкого застосування [4–6]. Сайт-специфічна рекомбінація відбувається в районі специфічної послідовності або сайта розпізнавання. Це призводить до розщеплення або з'єднання цільових послідовностей в результаті інтеграції, делеції чи інверсії фрагментів ДНК без набуття або втрати нуклеотидів [5, 6]. Найвідомішими рекомбіназними системами, що використовуються для елімінації маркерних генів, є виділена з бактеріофагу P1 сайт-специфічна рекомбіназна система Cre-loxP [7]. Рекомбіназа Cre належить до родини тирозинових інтеграз, а сама система складається з двох коротких послідовностей ДНК: lox (locus of crossing-over) та гена cre [5].

У ряді публікацій описано застосування сайт-специфічної рекомбіназної системи Cre-loxP під контролем тканинспецифічних промоторів та промоторних послідовностей, виділених з генів теплового шоку. Так, для регуляції роботи системи Cre-loxP використовуються промотор, ідентифікований в зародкових тканинах [8], або індукційний промотор до гена теплового шоку HSP81–1 [9]. Недоліком використання таких послідовностей є необхідність створення специфічних умов для проведення трансформації або ж залучення додаткових агентів для ініціації експресії рекомбінази. Тому для отримання генетично модифікованих рослин, вільних від СМГ, нами було розроблено новий підхід до використання сайт-специфічної рекомбіназної системи Cre-loxP [10]. Цей підхід характеризується тим, що маркерні гени та цільова послідовність в трансформуючій конструкції знаходяться під контролем –46 мінімального 35S промотору (перші 46 п. н. від загальної послідовності промотору 35S) з вірусу мозаїки кольорової капусти (CaMV). Використання відповідної ДНК-конструкції в даному випадку передбачає швидку та ефективну трансформацію рослини, а під час трансформації рослинного матеріалу та періоду селекції відповідає необхідності застосування додаткових агентів або створення специфічних умов зовнішнього середовища. Разом з тим досить часто після події трансформації, спостерігається припинення експресії Т-ДНК в наступних поколіннях трансформантів. Тому нашою метою було дослідження ефективності роботи сайт-специфічної рекомбінази Cre-loxP у наступному (T₁) поколінні трансформованих рослин *Arabidopsis thaliana* для отримання зразків, вільних від маркерних послідовностей.

Аналіз стабільності трансформації здійснювали впродовж кількох поколінь трансформантів *Arabidopsis thaliana* (L.) еко типу *Columbia*. З цією метою трансформацію рослин здійснювали за допомогою методу квіткового занурення в агробактеріальну суспензію. Для трансформації рослин використовували два типи ДНК конструкцій: pORE-lox1HGС та pORE-lox2HGС. Різниця в будові конструкцій полягала в порядку розташування генів у трансформуючій касеті, тому на схемі наводиться будова лише однієї з цих двох ДНК-конструкцій. Позитивним контролем для відстеження події трансформації слугувала ДНК-конструкція, що позбавлена гена cre та сайтів ексцизії. Обидві ДНК-конструкції містили такі послідовності, як ген рекомбінази cre, репортерний ген gus, ген стійкості до гігроміцину nptII, що обмежувались сайтами ексцизії loxP, та термінуюча послідовність нопалін-синтази (nos) (рис. 1). Перераховані послідовності знаходились під контролем 35S промотору. Ген hptII в обох конструкціях був винесений за межі сайтів loxP і у випадку здійснення події ексцизії залишався в геномі рослини. Із загальної кількості трансформованих рослин було проаналізовано по 60 зразків (у подальшому ліній) з покоління T₀ для кожного типу ДНК конструкції.

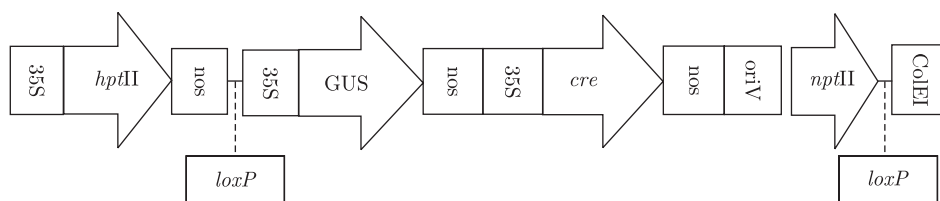


Рис. 1. Схема, яка ілюструє Т-ДНК конструкції рОРЕ-lox2HGC: 35S-промотор з віруса мозаїки кольорової капусти; *hptII* — ген стійкості до гігromіцину; *nos* — нопаліновий термінатор; *GUS* — ген глюкуронідази; *cre* — ген рекомбінази; *oriV* — сайт початку ініціації реплікації; *nptII* — ген неоміцинфосфотрансферази; *ColE1* — послідовність, що відповідає за реплікацію плазмід у клітинах бактерії *E. coli*

У подальшому насіння трансформованих рослин (покоління T_1) пророщували на селективному середовищі Мурасіге і Скуга [11] у присутності гігromіцину. Для виявлення подій ексцизії в геномі рослин за допомогою рекомбінази *Cre* в проростках на етапі селективного середовища проводили гістохімічний аналіз на наявність *GUS*-активності. Оскільки в обох типах конструкцій ген *gus* знаходився у ділянці, обмеженій сайтами ексцизії *loxP*, за допомогою *GUS*-тесту в проростках можна було встановити ефективність роботи рекомбінази. Гістохімічне визначення активності гену *gus* здійснювали методом, описаним у роботі [12]. Для того щоб уникнути ефект мовчання генів у введених Т-ДНК під час пророщування рослин на селективному середовищі, лінії з негативним або частково негативним результатом *GUS*-тесту були висаджені в ґрунт. Після культивування рослин у ґрунті впродовж 21–28 днів здійснювали повторний гістохімічний аналіз рослинних тканин на *GUS*-активність.

З метою підтвердження події видалення СМГ, обмежених сайтами ексцизії *loxP*, за допомогою рекомбінази *Cre* проводили молекулярно-генетичний аналіз геному рослин. Для проведення ПЛР виділяли ДНК зі свіжого листа за методом, описаним у статті [13]. Ампліфікацію цільових послідовностей (пара праймерів до послідовності в межах 35S промотору та гену *hptII*; пара праймерів до гену *cre*) за допомогою ПЛР здійснювали за такою схемою: початкова денатурація $-94\text{ }^\circ\text{C}$, 30 цикл. [$92\text{ }^\circ\text{C} - 30\text{ с}$, $60\text{ }^\circ\text{C} - 30\text{ с}$, $72\text{ }^\circ\text{C} - 90\text{ с}$], $72\text{ }^\circ\text{C} - 5\text{ хв}$. Продукти ампліфікації розділяли в 0,8%-му агарозному гелі. Для проведення Саузерн блот-гібридизації геномну ДНК виділяли, згідно з методом, описаним у статті [14]. Геномну ДНК (не менше 2 мкг на зразок) розрізали за допомогою рестриктази *KpnI*, яка розпізнає сайти на межі 5' та 3' кінців гену *hptII*. Фрагменти ДНК розділяли у 0,8%-му агарозному гелі та переносили на нітроцелюлозний фільтр. Для гібридизації використовували послідовність гена *hptII*, мічену $\alpha\text{-P}^{32}$ по цитозину.

Аналіз ефективності проростання насіння на селективному середовищі показав, що стабільність трансформації за допомогою обох типів векторних конструкцій (рОРЕ-lox1HGC й рОРЕ-lox2HGC) у поколінні T_1 є високою. Отримані дані свідчать про стабільну експресію кожної з векторних конструкцій в трансформантах. Отримані результати подальшого аналізу трансформантів з використанням *GUS*-тесту трансгенних ліній арабідопсису було поділено на три групи: перша — лінії з позитивним результатом *GUS*-тесту (рослини забарвлювались повністю); друга — лінії, в яких були присутні проростки з позитивним і негативним результатами *GUS*-тесту; третя — лінії з негативним результатом *GUS*-тесту. Відзначено, що в лініях першої групи досить велика кількість зразків була забарвлена лише частково (неоднорідне забарвлення тканин або окремих частин рослини), що вказує на виникнення химерності. Неоднорідне забарвлення рослинних тканин свідчить про видалення маркерних послідовностей з геном *gus* не з усього організму, а лише в окремих

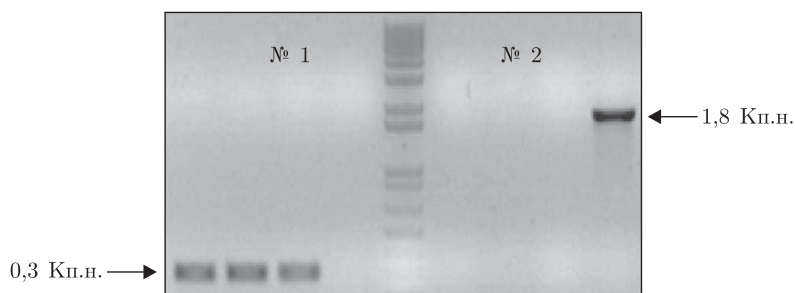


Рис. 2. Детекція видалення маркерної послідовності рекомбіназою Cre за допомогою ПЛР (у 0,8%-му агарозному гелі): 1 — перевірка присутності ДНК конструкції в рослинному геномі (праймери до 35S промотору та *nptII*), розмір продукту 0,3 Кbp; 2 — виявлення рослин із неактивною рекомбіназою Cre (праймери до послідовностей в межах сайтів ексцизії), розмір продукту 1,8 Кbp (подія автоексцизії не відбулась)

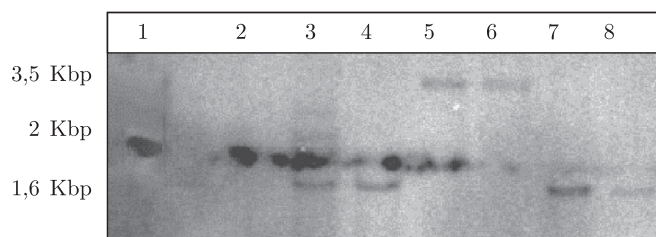


Рис. 3. Блот-гібридизація геномної ДНК різних ліній трансгенних рослин арабідопсису покоління T₁ до міченої послідовності гена *hptII*: 1 — позитивний контроль, плазміда pORE-lox2HGC; 2 — негативний контроль (ДНК з дикого типу *A. thaliana*); 3–5 та 7, 8 — видалення ділянки ДНК, обмеженої *loxP*-сайтами з геному трансформантів; 6, 7 — зразки геномів трансформантів з невидаленими ділянками СМГ

сукупностях клітин. За результатами GUS-тесту з'ясували, що приблизно 25% досліджуваних ліній, трансформованих ДНК конструкцією pORE-lox1HGC, є вільними від маркерних послідовностей, а в 12% ліній було виявлено як GUS-позитивні, так і GUS-негативні зразки. В лініях, трансформованих ДНК-конструкцією pORE-lox2HGC, відбулась автоексцизія в 15% загальної кількості протестованих ліній. Кількість ліній другої групи становила 13%. За результатами попереднього гістохімічного аналізу, проведеного на рослинах покоління T₀, відзначено приріст ліній третьої групи приблизно на 5–7% для кожного типу ДНК-конструкції, що свідчить про роботу рекомбінази і в наступних поколіннях трансформантів.

Для підтвердження роботи рекомбінази та події видалення ДНК у межах сайтів ексцизії після 3–4 тижнів культивування рослин у ґрунті було проведено їх ПЛР аналіз (рис. 2). У реакції використовувались праймери до 35S промотору та гена *hptII* поза межами сайтів ексцизії *loxP*, а також пара праймерів до гена *nptII*.

Саузерн-блот аналіз здійснювали для підтвердження результатів ПЛР та для виявлення мультикопійності Т-ДНК у геномі (рис. 3). Оскільки експресія привнесених генів у рослинах залежить від кількості копій Т-ДНК на геном, використання рекомбіназної ексцизії дає змогу мінімізувати ефект мультикопійності. Вперше така властивість сайт-специфічних рекомбіназ була описана в роботі [15]. Отже, за допомогою проведеної блот-гібридизації виявлено, що в зразках 7 й 8 кількість Т-ДНК зведена до мінімуму на геном.

Таким чином, в ході проведеної роботи, продемонстровано ефективне використання нового підходу для отримання трансгенних ліній рослин, вільних від маркерних послідовностей, та досягнення стабільності експресії Т-ДНК в наступному поколінні трансформантів.

За допомогою проведеного гістохімічного аналізу трансформантів покоління T₁ нами відзначена стабільна експресія Т-ДНК у рослинному геномі для обох типів конструкцій. Разом з тим у деяких трансформантів з позитивним результатом GUS-тесту експресія гена *gus* спостерігалась нерівномірно в різних тканинах рослин, що свідчить про їх химерність (неоднорідне забарвлення тканин). Відповідно можна вважати, що в наступних поколіннях ліній з химерними зразками сайт-специфічне видалення маркерних послідовностей відбудеться до кінця. Крім цього було з'ясовано, що в поколінні рослин T₁ кількість ліній арабідопсису, вільних від маркерних послідовностей, підвищувалась приблизно на 5–7%. Отже, методика отримання трансформантів з використанням сайт-специфічної рекомбіназної системи Cre/*loxP* є простою та не вимагає проходження додаткових етапів для активації роботи рекомбінази. Тому даний підхід можна ефективно застосовувати для отримання генетично модифікованих рослин, вільних від маркерних послідовностей.

1. Rosellini D. Selectable markers and reporter genes: A well furnished toolbox for plant science and genetic engineering // *Crit. Rev. Pla.* – 2012. – **31**, No 5. – P. 401–453.
2. Yemets A. I., Baird W. V., Blume Ya. B. Modified tubulin genes as selectable markers for plant transformation // *The Plant Cytoskeleton: Key Tool for Agro-Biotechnology* / Ed. Ya. B. Blume, W. V. Baird, A. I. Yemets, D. Breviaro. – NATO Sci. Peace and Security, Series C: Environmental Security, 2009. – P. 435–454.
3. Manimaran P., Ramkumar G., Sakthivel K. et al. Suitability of non-lethal marker and marker-free systems for development of transgenic crop plants: Present status and future prospects // *Biotech. Adv.* – 2011. – **29**, No 6. – P. 703–714.
4. Рукавцова Е. Б., Лебедева А. А., Захарченко Н. С., Бурьянов Я. И. Пути создания биобезопасных трансгенных безмаркерных растений // *Физиология растений.* – 2013. – **60**, № 1. – С. 17–30.
5. Grindley N. D., Whiteson K. L., Rice P. A. Mechanisms of site specific recombination // *Annu. Rev. Biochem.* – 2006. – **75**. – P. 567–605.
6. Wang Y., Yau Y.-Y., Perkins-Balding D., Thompson J. G. Recombinase technology: applications and possibilities // *Plant. Cell. Rep.* – 2011. – **30**. – P. 267–285.
7. Sauer B., Henderson N. Targeted insertion of exogenous DNA into the eukaryotic chromosome by the cre recombinase // *New Biol.* – 1990. – **2**. – P. 441–449.
8. Kopertekh L., Schulze K., Frolov A. et al. Cre-mediated seed-specific transgene excision in tobacco // *Plant. Mol. Biol.* – 2010. – **72**. – P. 597–605.
9. Liu H. K., Yang C., Wei Z. W. Heat shock-regulated site-specific excision of extraneous DNA in transgenic plants // *Plant. Sci.* – 2005. – **168**. – P. 997–1003.
10. Sekan A., Isaenkov S. New approach in site-specific recombinase Cre/*loxP* technology for producing of marker-free transgenic plants // In: 7th EPSO Conf. “Plants for a Greening Economy”, 1–4 Sept. 2013. – Porto Heli, Greece, 2013. – P. 163.
11. Murashige T., Skoog F. A revised medium for rapid growth and bio assays with tobacco tissue cultures // *Phys. Plant.* – 1962. – **15**, No 3. – P. 473–497.
12. Jefferson R. A. Assaying chimeric genes in plants: the GUS gene fusion system // *Plant Mol. Biol. Rep.* – 1987. – **5**, No 3. – P. 87–405.
13. Murray M. G., Thompson W. F. Rapid isolation of high molecular weight plant DNA // *Nucl. Acid. Res.* – 1980. – **8**, No 19. – P. 4321–4325.
14. Dellaporta S. L., Wood J., Hicks J. B. A plant DNA miniprep: version II // *Plant. Mol. Biol. Rep.* – 1983. – **1**, No 4. – P. 19–21.
15. Srivastava V., Anderson O. D., Ow D. W. Single-copy transgenic wheat generated through the resolution of complex integration patterns // *Proc. Nat. Acad. Sci. USA.* – 1999. – **96**. – P. 11117–11121.

А. С. Секан, С. В. Исаенков

**Одноэтапное получение трансформантов *Arabidopsis thaliana*,
не содержащих маркерных последовательностей, с помощью
сайт-специфической рекомбиназной системы Cre/loxP
под контролем минимального 35S промотора**

*В ряде публикаций описано использование сайт-специфической рекомбиназной системы Cre/loxP под контролем тканеспецифических промоторов для получения трансформантов, не содержащих селективных маркерных генов (СМГ). Недостатком в данном случае является необходимость создания специфических условий во время трансформации или вовлечения дополнительных агентов для инициации экспрессии рекомбиназы. Нами разработан новый подход к использованию сайт-специфической рекомбиназной системы Cre/loxP для получения генетически модифицированных растений, свободных от СМГ, и установлена эффективность работы рекомбиназы Cre в следующем поколении трансформированных растений *A. thaliana*.*

A. S. Sekan, S. V. Isaenkov

**One-step transformation with site-specific recombinase Cre/loxP
system under the control of minimal 35S promoter for the development
of marker-free transgenic *Arabidopsis thaliana* plants**

*In a number of works, the successful use of the site-specific recombinase system Cre/loxP under the control of chemical promoters to obtain marker-free transgenic plants was described. However, providing the transformation process with the conditional or another kind of treatment to initiate the recombinase expression is the disadvantage of this method. We have developed a new approach in the site-specific recombinase system Cre/loxP to produce marker-free genetically modified plants without any treatment and shown the efficiency of Cre recombinase in the progeny of transformed plants *A. thaliana*.*



УДК 616.12.-009.72:615.273.53:612.017.1

Т. В. Завальська

Вплив антиагрегантної терапії на імунологічний статус у хворих на уперше виниклу стенокардію

(Представлено академіком НАН України О. О. Мойбенком)

Обстежено 42 хворих на уперше виниклу стенокардію (УВС) віком від 45 до 65 років і 18 клінічно здорових людей. Популяції і субпопуляції лімфоцитів визначали за методом моноклональних антитіл, імуноглобуліни Ig G, Ig A, Ig M та циркулюючі імунні комплекси (ЦК) у плазмі крові — за методом Манчіні. Результати дослідження показали, що комбінація клопідогрелю з аспірином (аспігрель) у базисній терапії хворих на УВС є більш ефективною порівняно з базисною терапією, яка включала тільки клопідогрель, про що свідчить позитивна динаміка переважної кількості показників імунного статусу хворих. Після проведеного лікування у хворих на УВС не виявлено повної нормалізації показників клітинного і гуморального імунітету, що, можливо, пов'язано з вираженим пригніченням загальної імунної відповіді у цієї категорії хворих і необхідністю пошуку нових лікарських засобів.

В усіх сучасних кардіологічних посібниках прийом антитромбоцитарних засобів є обов'язковим компонентом лікування ішемічної хвороби серця (ІХС) та стенокардії [1–4, 6, 8]. Зокрема, основними антитромбоцитарними препаратами в арсеналі сучасного лікаря є аспірин, тиклопідин, клопідогрель [9, 10]. Аспірин — „еталонний” і обов'язковий засіб антитромбоцитарної терапії у всіх хворих на ІХС, у яких немає протипоказань, а також при лікуванні хворих з атеросклерозом інших відділів судинного русла [3]. В основі антитромбоцитарної дії ацетилсаліцилової кислоти (аспірину) лежить інгібування циклооксигенази та синтезу тромбоцитарного тромбоксану А₂. При призначенні аспірину пацієнтам зі стабільною стенокардією в середньому на 33% знижується ризик несприятливих серцево-судинних подій: інфаркту міокарда, раптової смерті [2–4, 6].

Клопідогрель інгібує агрегацію тромбоцитів, викликану АДФ, тромбіном, колагеном, тромбоксаном А₂ і фактором агрегації тромбоцитів. Крім того, при стабільній стенокардії тиклопідин знижує в'язкість крові, зменшуючи концентрацію фібриногену плазми. Подібно тиклопідину, клопідогрель є похідним тієнопіридину, однак перевершує тиклопідин за антитромботичним ефектом.

© Т. В. Завальська, 2014

У пацієнтів, які перенесли гострий коронарний синдром, при наявності протипоказань або при виникненні побічних ефектів аспірину можна застосувати альтернативні антиагреганти — тиклопідин або клопідогрель [1, 7, 9, 11]. Крім того, поєднання аспірину і клопідогрелю дозволяє підвищити ефективність лікування гострого коронарного синдрому порівняно з застосуванням лише аспірину (дослідження CURE, 2001) [7]. Відомо, що імунне запалення на сучасному етапі наукових досліджень розглядається як один з провідних механізмів атеросклерозу. Доцільним є проаналізувати зміни імунного статусу хворих з нестабільною стенокардією (НС) під впливом клопідогрелю і комбінованого препарату аспігрелю, який поєднує клопідогрель з аспірином.

Мета нашого дослідження — вивчення динаміки змін клітинного та гуморального імунітету під впливом клопідогрелю і аспігрелю у хворих на уперше виниклу стенокардію (УВС).

Матеріал і методи дослідження. Обстежено 42 хворих на уперше виниклу стенокардію (УВС) віком від 45 до 65 років (середній вік становив 54,6–8,5 рока) і 18 клінічно здорових людей (КГ). Діагноз НС встановлювали на підставі Наказу МОЗ № 436 від 03.07.2006 р. (Протокол надання медичної допомоги хворим із гострим коронарним синдромом без елевачії ST (інфаркт міокарда без зубця Q і нестабільна стенокардія). Код МКХ 10: I20 — I22.). За класифікацією, наданою в рекомендаціях з діагностики та лікування НС Агенства США з політики в галузі охорони здоров'я та наукових досліджень за рекомендацією Є. Браунвальда (1996 р.) [5], для дослідження були взяті хворі з УВС (діагноз встановлюється протягом 28 днів від появи першого ангінозного нападу). В обстеження не включали хворих із серцевою недостатністю II Б та III стадії, миготливою аритмією, супутніми захворюваннями в стадії декомпенсації, онкологічними захворюваннями, захворюваннями опорно-рухового апарату.

Визначення популяції і субпопуляції лімфоцитів проводили методом моноклональних антитіл (визначення фенотипування лімфоцитів в тестах розеткоутворення з частинками, покритими моноклональними антитілами CD3, CD4, CD8, CD22), де CD3+ — популяція Т-лімфоцитів; CD4+ — субпопуляція Т-хелперів; CD8+ — субпопуляція Т-супресорів; CD22+ — популяція В-лімфоцитів. Імуноглобуліни Ig G, A, M та циркулюючі імунні комплекси (ЦІК) у плазмі крові визначали за методом Манчіні.

Результати та обговорення. Після базисної терапії, яка включала клопідогрель, у хворих на УВС нормалізувалися такі показники клітинного імунітету: субпопуляція Т-хелперів (CD4+), субпопуляція Т-супресорів (CD8+), популяція В-лімфоцитів (CD22+), імунорегуляторний індекс (ІРІ). У хворих на УВС, терапія яких включала аспігрель, крім наведених показників, виявлено ще нормалізацію популяції Т-лімфоцитів (CD+) (див. табл. 1).

Привертає увагу те, що у хворих на УВС, базисна терапія яких включала клопідогрель, не спостерігається позитивної динаміки показників гуморального імунітету, а у хворих, які приймали аспігрель, нормалізувалися IgG і ЦІК.

Необхідно відзначити, що у досліджуваних пацієнтів обох груп після проведеного лікування виявлено достовірно нижчий вміст лімфоцитів і рівень IgA, що, можливо, пов'язано з пригніченням загальної імунної відповіді у хворих на ІХС.

При порівнянні динаміки клітинного і гуморального імунітету у хворих на УВС, які приймали базисну терапію з включенням клопідогрелю або аспігрелю, спостерігається достовірна різниця за деякими показниками імунного статусу.

У хворих, що приймали аспігрель, порівняно з хворими, терапія яких включала клопідогрель, виявлено достовірно вищий вміст лімфоцитів — на 18,8%, популяції Т-лімфоцитів

Таблиця 1. Динаміка імунологічних показників у хворих на УВС після лікування з включенням клопідогрелю і аспігрелю порівняно з КГ ($M \pm m$)

| Показники | КГ (I) | УВС (II) (клопідогрель) | УВС (III) (аспігрель) | Р I-II | Р I-III | Р II-III |
|--------------|------------|----------------------------|--------------------------|--------|---------|----------|
| Лімфоцити, % | 29,95–0,61 | 17,3–0,12 | 21,3–0,21 | < 0,01 | < 0,05 | < 0,05 |
| CD3+, % | 49,3–2,7 | 39,4–1,18 | 47,34–1,18 | < 0,01 | > 0,05 | < 0,05 |
| CD4+, % | 31,19–1,32 | 33,1–0,13 | 35,2–0,15 | > 0,05 | < 0,05 | > 0,05 |
| CD8+, % | 20,59–0,97 | 19,6–0,51 | 20,54–0,34 | > 0,05 | > 0,05 | > 0,05 |
| CD22+, % | 19,46–1,5 | 18,1–0,32 | 18,10,32 | > 0,05 | > 0,05 | > 0,05 |
| CD4/CD8 | 1,58–0,01 | 1,82–0,06 | 1,7–0,05 | > 0,05 | > 0,05 | > 0,05 |
| IgA, г/л | 2,34–0,07 | 1,91–0,03 | 1,85–0,06 | < 0,05 | < 0,05 | > 0,05 |
| IgM, г/л | 1,05–0,09 | 1,06–0,04 | 1,09–0,07 | > 0,05 | > 0,05 | > 0,05 |
| IgG, г/л | 10,96–0,84 | 12,16–0,43 | 10,24–0,37 | < 0,05 | > 0,05 | < 0,05 |
| ЦІК, ум. од. | 1,42–0,06 | 3,7–0,52 | 2,01–0,12 | < 0,05 | > 0,05 | < 0,05 |

(CD3+) — на 16,8%, а також достовірно менший рівень IgG — у 1,2 раза, рівень ЦІК — у 1,8 раза.

Порівнявши результати лікування хворих на УВС, які отримували базисну терапію з включенням клопідогрелю або аспігрелю з КГ, можна дійти висновку: у хворих, які отримували аспігрель, виявлено більше показників, які свідчать про позитивний розвиток патофізіологічних процесів, що, в свою чергу, може вказувати на позитивний розвиток захворювання в цілому.

Отже, можна зробити такі висновки.

1. Комбінація клопідогрелю з аспірином (аспігрель) у базисній терапії хворих на УВС є більш ефективною порівняно з базисною терапією, яка включала тільки клопідогрель, про що свідчить позитивна динаміка переважної кількості показників імунного статусу у хворих II групи.

2. Після проведеного лікування у хворих на УВС двох досліджуваних груп не спостерігається повної нормалізації показників клітинного і гуморального імунітету, що, можливо, пов'язано з вираженим пригніченням загальної імунної відповіді у цієї категорії хворих і необхідністю пошуку нових лікарських засобів.

1. Барышникова Г. А. Роль клопидогреля в лечении и профилактике сердечно-сосудистых заболеваний // CONSILIUM MEDICUM. – 2012. – 11, № 10. – P. 130–137.
2. Грацианский Н. А. К выводу рекомендаций Всероссийского научного общества кардиологов “Лечение острого коронарного синдрома без стойких подъемов сегмента ST на ЭКГ” // Кардиология. – 2002. – 42, № 1. – С. 4–14.
3. Жарінов О. И. Пріоритети лікування хронічної ішемічної хвороби серця // Медицина світу. – 2007. – № 8. – С. 23–28.
4. Anand S. S., Yusuf S. Oral anticoagulant therapy in patients with coronary artery disease: a metaanalysis // JAMA. – 1999. – 282. – P. 2058–2067.
5. Braunwald E., Jones R. H., Mark D. B. et al. Diagnosing and Managing Unstable Angina // Circulation. – 1996. – 89. – P. 1449–1468.
6. CAPRIE Steering Committee. Clopidogrel vs Aspirin in Patients at Risk of Ischemic Events A randomised, blinded trial of clopidogrel versus aspirin in patients at risk of ischaemic events (CAPRIE) // Lancet. – 1996. – 348. – P. 1329–1339.
7. Clopidogrel in Unstable Angina to Prevent Recurrent Events trial investigators. Effects of clopidogrel in addition to aspirin in patients with acute coronary syndromes without ST. segment elevation // New Engl. J. Med. – 2001. – 345. – P. 494–502.
8. Collaborative metaanalysis of randomized trials of antiplatelet therapy for prevention of death, myocardial infarction and stroke in high risk patients // BMJ. – 2002. – No 12. – 324 (7329). – P. 7186.

9. *Effects of clopidogrel in addition to aspirin in patients with acute coronary syndromes without ST-segment elevation* // N Engl. J. Med. – 2001. – No 16. – **347**, No 7. – P. 494–502.
10. *Hankley G. J., Sudlow C. L. M., Dunbabin D. W. et al. Thienopyridine derivatives (ticlopidine, clopidogrel vs aspirin) for preventing stroke and other serious vascular events in high vascular risk patients* // The Cochrane Library. – 2000. – Iss. 2. – Oxford: Update Software.
11. *Yusuf S., Mehta S. R., Zhao F. et al. On Behalf of the CURE (Clopidogrel in Unstable angina to prevent Recurrent Events) Trial Investigators. Early and Late Effects of Clopidogrel in Patients With Acute Coronary Syndromes* // Circulation. – 2003. – **107**. – P. 966–972.

Національний медичний університет
ім. О. О. Богомольця, Київ

Надійшло до редакції 23.07.2013

Т. В. Завальська

Влияние антиагрегантной терапии на иммунный статус у больных с впервые возникшей стенокардией

Обследовано 42 больных с впервые возникшей стенокардией (ВВС) возрастом от 45 до 65 лет и 18 клинически здоровых людей. Популяции и субпопуляции лимфоцитов определяли методом моноклональных антител, иммуноглобулины Ig G, Ig A, Ig M и циркулирующие иммунные комплексы (ЦИК) в сыворотке крови — методом Манчини. Результаты исследования показали, что комбинация клопидогреля с аспирином (аспигрель) в базисной терапии больных с ВВС является более эффективной по сравнению с базисной терапией, которая включала только клопидогрель, о чем свидетельствует положительная динамика преобладающего количества показателей иммунного статуса больных. После проведенного лечения у больных с ВВС не выявлено полной нормализации показателей клеточного и гуморального иммунитета, что, возможно, связано с выраженным угнетением общего иммунного ответа у этой категории больных и необходимостью поиска новых лекарственных средств.

T. V. Zavalskaya

Antiplatelet therapy impact on immunological status in patients with recent onset of angina pectoris

The study involved 42 patients with recent onset of stenocardia (ROS) aged 45 to 65 and 18 clinically healthy individuals. Determination of populations and subpopulations of lymphocytes was performed by monoclonal antibodies. Determination of immunoglobulins Ig G, Ig A, Ig M and circulating immune complexes (CIC) in blood serum was performed by the Mancini method. The results showed that basic treatment of patients with ROS by clopidogrel with aspirin (aspigrel) combination is more effective than the basic treatment that included only clopidogrel, which was indicated by the positive trend of more indicators of patients' immune status. Full normalization of cellular and humoral immunity indices wasn't found in patients with ROS after treatment, which is possibly associated with a marked inhibition of the overall immune response in these patients and the need to find new drugs.

Інформація для авторів журналу «Доповіді Національної академії наук України»

Редакція журналу приймає для публікації повідомлення, що мають *мотивоване представлення* дійсного члена або члена-кореспондента НАН України з відповідної спеціальності. До статті додається супровідний лист організації, в якій виконано дослідження.

Журнал друкує не більше *трьох повідомлень одного автора* на рік. Повідомлення дійсних членів та членів-кореспондентів НАН України друкуються без обмежень.

У разі додаткового рецензування та переробки статті датою надходження вважається дата одержання редакцією її остаточного тексту. Прохання редакції про переробку не означає, що стаття прийнята до друку; після переробки вона знову розглядається редколегією. При відмові в публікації роботи редколегія залишає за собою право не повертати автору один екземпляр статті.

Повідомлення публікуються українською *або* російською мовою. Автор зазначає рубрику, в якій має публікуватися повідомлення, індекс за Універсальною десятиковою класифікацією; в кінці повідомлення наводить повну назву організації, де виконане дослідження, свою поштову і *електронну* адресу та номер телефону. Кожний примірник повідомлення має бути підписаний автором.

Обсяг повідомлення не повинен перевищувати *шести сторінок журналу* (включаючи список літератури — до 15 поз., таблиці, рисунки — до 4).

Фізичні величини наводяться в одиницях СІ. Наукова термінологія повинна відповідати «Російсько-українському словнику наукової термінології» (Київ: Наук. думка. — Т. 1–3. — 1994, 1996, 1998).

Резюме українською, російською та англійською мовами *подаються на окремій сторінці* (обов'язково вказати написання прізвищ та назву статті трьома мовами).

Рукопис та рисунки (*на окремій сторінці*) слід надсилати у *двох* екземплярах. Текст має бути підготовлений методом комп'ютерного набору та роздрукований на білому папері через 1,5 інтервала на одній стороні аркуша, розмір шрифту 14 пт.

Електронну версію статті автор надсилає на вимогу редакції безпосередньо при підготовці відповідного номеру журналу до друку (термін узгоджується в редакції). Файл статті подається у форматі **ІАТ_ЕX2_ε** та з результатом трансляції у dvi- чи pdf-файл. **Текст у файлі повинен точно відповідати надрукованому тексту.** Рисунки потрібно записувати окремими файлами у вихідному форматі та у форматі .eps. Для імен файлів використовувати зрозумілі короткі назви, набрані *латинськими* літерами (для статті — прізвище першого автора, для рисунків — rys1, rys2 і т.д.). Статті, що не містять математичних формул, можна подавати в форматі **Word**.

Список літератури складається в порядку посилання в тексті; оформлення літературних джерел повинно відповідати вимогам журналу (див. списки літератури в останніх номерах журналу).

Коректура статей авторам не надсилається.

Адреса редакції: Україна, 01601, Київ, вул. Терещенківська, 3, тел. (044) 235-12-16

Автор може передплатити номер журналу, в якому надруковано його статтю, у відділенні зв'язку «Укрпошти» (індекс 74137), а також у агенції «Укрінформнаука» (e-mail: innovation@nas.gov.ua; тел./факс: +38(044)239-64-57).