М А Т Е М А Т И К А

УДК 512.53

ТРАНСВЕРСАЛІ ВІДНОШЕНЬ ГРІНА ОРТОГОНАЛЬНОЇ СУМИ НАПІВГРУП

Ю.В.Жучок,
Луганський національний педагогічний університет імені Тараса Шевченка

1. Вступ

Однією з конструкцій, що дозволяє ефективно вивчати структурні властивості напівгруп з нулем, є конструкція 0-сполуки напівгруп і, зокрема, ортогональна сума напівгруп. Перші дослідження цієї напівгрупової конструкції належать Е.С. Ляпіну [1], [2] та Ш. Шварцу [3], після чого ортогональні декомпозиції використовувались багатьма авторами у різних випадках (див. напр., [4,5]). Проблема існування найбільшої ортогональної декомпозиції напівгрупи з нулем розглядалась Богдановичем та Чиричем [6]. Декомпозиції напівгруп з нулем у ортогональну (ліву, праву, прямокутну) суму напівгруп вивчались в [7-9], а автоморфізми ортогональної суми, – в [10].

Іншим поняттям, важливим при вивченні структурних властивостей напівгруп, є поняття трансверсалі, що відповідає еквівалентності, розглядуваній на деякій напівгрупі. Серед перших результатів про трансверсалі є опис, отриманий Д. Кованом і Н. Рейлі [11] трансверсалей $\mathfrak{H}$-еквівален-тності Гріна на скінченній симетричній інверсній напівгрупі. Пізніше, для цієї ж напівгрупи О. Ганюшкін та В. Мазорчук [12] знайшли описання трансверсалей $\mathfrak{L}$– та $\mathfrak{R}$-еквівалентностей Гріна. Трансверсалі відношень Гріна $\mathfrak{L}$, $\mathfrak{R}$ та їх теоретико-множинного перетину $\mathfrak{H}$ на нескінченній симетричній інверсній напівгрупі, а також трансверсалі деяких гріновських відношень на повній скінченній симетричній напівгрупі перетворень вивчались в [13, 14]. У напівгрупі Брауєра опис трансверсалей $\mathfrak{L}$– та $\mathfrak{R}$-еквіва-лентностей Гріна був отриманий Г. Кудрявцевою, В. Мальцевим та В. Мазорчуком [15]. Отже, актуальною у цьому напрямку є задача опису трансверсалей відношень Гріна на ортогональній сумі довільних напівгруп.

2. Основні поняття

Нехай S – довільна напівгрупа. Якщо напівгрупа S має нульовий елемент 0, то будемо позначати її через S^0.

Напівгрупу S^0 називають *ортогональною сумою* напівгруп $S_\alpha, \alpha \in Y$, позначаючи $S^0 = \sum_{\alpha \in Y} S_\alpha$, якщо $S_\alpha, \alpha \in Y$ – ненульові напівгрупи, $S^0 = \bigcup_{\alpha \in Y} S_\alpha$ і при будь-яких $\alpha, \beta \in Y, \alpha \neq \beta$ виконуються умови $S_\alpha \cap S_\beta = S_\alpha \cdot S_\beta = \{0\}$.

Нехай $S^0 = \sum_{\alpha \in Y} S_\alpha$ – ортогональна сума. В цьому випадку, сімейство $D = \{S_\alpha \mid \alpha \in Y\}$ називається *ортогональною декомпозицією* напівгрупи S^0 (або *декомпозицією* S^0 *в ортогональну суму*), а піднапівгрупи $S_\alpha, \alpha \in Y$ – *ортогональними компонентами* сімейства D.

На множині всіх ортогональних декомпозицій S^0 визначимо частковий порядок $\leq$ таким чином: $D \leq D'$, якщо кожна ортогональна компонента сімейства D' є підмножиною деякої ортогональної компоненти сімейства D.

Напівгрупа S^0 називається *нерозкладною в ортогональну суму напівгруп*, якщо сімейство $D = \{S^0\}$ – єдина ортогональна декомпозиція напівгрупи S^0.

Взагалі, Богдановичем та Чиричем [8] доведено, що будь-яка напівгрупа з нулем має найбільшу ортогональну декомпозицію, при цьому компоненти цієї декомпозиції є ортогонально нерозкладними.

3. Відношення подільності

В цьому пункті розглядається опис відношень подільності на довільній ортогональній сумі напівгруп.

3.1. Нехай S – довільна напівгрупа. Через S^1 будемо позначати напівгрупу S, якщо S має одиницю, і напівгрупу S із зовнішньо приєднаною одиницею 1, в протилежному випадку.

© Жучок Ю.В.

На довільній напівгрупі S бінарні відношення

$$\delta_l^S = \{(a;b) \in S \times S \mid \exists x \in S^1 : b = xa\},$$
$$\delta_r^S = \{(a;b) \in S \times S \mid \exists x \in S^1 : b = ax\},$$
$$\delta_{lr}^S = \{(a;b) \in S \times S \mid \exists x, y \in S^1 : b = xay\}$$

називаються *відношеннями лівої, правої* і, відповідно, *двобічної подільності* в напівгрупі S.

Відношення $\delta_t^S = \{(a;b) \in S \times S \mid \exists x, y \in S^1 : b = xa = ay\}$ назвемо відношенням *квазіподільності.*

Критеріальні властивості відношень подільності довільної ортогональної суми напівгруп описує наступна

Лема. Нехай S^0 – довільна ортогональна сума напівгруп $S_\alpha, \alpha \in Y$ і $a,b \in S^0$. Тоді для кожного $x \in \{l,r,lr,t\}$ умова $(a;b) \in \delta_x^{S^0}$ виконується тоді й лише тоді, коли $(a;b) \in \delta_x^{S_\alpha}$ для деякого $\alpha \in Y$.

Доведення. Нехай $(a;b) \in \delta_l^{S^0}$, де $(a;b) \neq (0;0)$. Тоді існує $c \in (S^0)^1$ таке, що $b = ca$. Якщо $b \neq 0$, то $a \neq 0, c \neq 0$, звідки або $a = b \in S_\alpha, c = 1$ або $a,b,c \in S_\alpha$, де $a \neq b$, для деякого $\alpha \in Y$. Отже, $(a;b) \in \delta_l^{S_\alpha}$. Якщо $b = 0$, тоді $a \neq 0$ і умова $b = ca$ матиме місце або при $c = 0$, або коли $c \neq 0$ і c,a – дільники нуля, звідки теж $(a;b) \in \delta_l^{S_\alpha}$. Зрозуміло, що $(0;0) \in \delta_l^{S_\alpha}$.

Якщо ж $(a;b) \in \delta_l^{S_\alpha}$ для деякого $\alpha \in Y$, то, очевидно, $(a;b) \in \delta_l^{S^0}$.

Аналогічні міркування можна провести і для відношення $\delta_r^{S^0}$.

Нехай $(a;b) \in \delta_t^{S^0}$, де $(a;b) \neq (0;0)$. Тоді $(a;b) \in \delta_l^{S^0}$ і $(a;b) \in \delta_r^{S^0}$, а це за щойно доведеним, виконується лише у випадку, коли $(a;b) \in \delta_l^{S_\alpha}$ для деякого $\alpha \in Y$ та $(a;b) \in \delta_r^{S_\beta}$ для деякого $\beta \in Y$. Звідси $\alpha = \beta$ і, отже, $(a;b) \in \delta_t^{S_\alpha}$. Якщо ж $(a;b) = (0;0)$, то теж $(a;b) \in \delta_t^{S_\alpha}$. Обернене твердження є очевидним.

Подібним чином доводиться твердження і для відношення $\delta_{lr}^{S^0}$.

Лему доведено.

3.2. З леми попереднього пункту природно отримуємо

Наслідок. Нехай $S^0 = \sum_{\alpha \in Y} S_\alpha$ – ортогональна сума. Тоді для будь-якого $x \in \{l,r,lr,t\}$

$$\delta_x^{S^0} = \bigcup_{\alpha \in Y} \delta_x^{S_\alpha},$$

при цьому $\delta_x^{S_i} \cap \delta_x^{S_j} = \{(0;0)\}$ для всіх $i,j \in Y$ таких, що $i \neq j$.

4. Відношення Гріна

Одними з фундаментальних відношень еквівалентності, які можна визначити на будь-якій напівгрупі, є відношення Гріна. Ці відношення вперше визначив та розпочав вивчати Грін [16], вони є корисними при вивченні будови напівгруп. Так, в цьому пункті розглядається опис всіх відношень Гріна на довільній ортогональній сумі напівгруп.

4.1. Якщо S – довільна напівгрупа, то бінарні відношення

$$\mathfrak{L}^S = \{(a,b) \in S \times S \mid S^1 a = S^1 b\},$$
$$\mathfrak{R}^S = \{(a,b) \in S \times S \mid aS^1 = bS^1\},$$
$$\mathfrak{J}^S = \{(a,b) \in S \times S \mid S^1 aS^1 = S^1 bS^1\}$$

називаються $\mathfrak{L}$*-еквівалентністю*, $\mathfrak{R}$*-еквівалентністю* і, відповідно, $\mathfrak{J}$*-еквівалентністю Гріна.*

За допомогою $\mathfrak{L}$– та $\mathfrak{R}$-еквівалентностей Гріна визначається відношення еквівалентності $\mathfrak{D}^S$, яке є найменшою еквівалентністю $\mathfrak{L}^S \vee \mathfrak{R}^S$, яка містить як $\mathfrak{L}^S$, так і $\mathfrak{R}^S$. Відношення $\mathfrak{D}^S$ називають

$\mathfrak{D}$ *-еквівалентністю Гріна* напівгрупи S. Відомо (див., напр.,[17]), що $\mathfrak{D}^S = \mathfrak{L}^S \circ \mathfrak{R}^S = \mathfrak{R}^S \circ \mathfrak{L}^S$, де $\circ$ – звичайна операція композиції бінарних відношень.

Відношення, яке є перетином $\mathfrak{L}$ – та $\mathfrak{R}$ -еквівалентностей Гріна позначається через $\mathfrak{H}^S$ та називається $\mathfrak{H}$ *-еквівалентністю Гріна.*

Опис усіх відношень Гріна ортогональної суми напівгруп дає

Лема. Нехай S^0 – довільна ортогональна сума напівгруп $S_\alpha, \alpha \in Y$ і $a,b \in S^0$. Тоді для кожного $\rho \in \{\mathfrak{L},\mathfrak{R},\mathfrak{J},\mathfrak{D},\mathfrak{H}\}$ умова $(a;b) \in \rho^{S^0}$ виконується тоді й лише тоді, коли $(a;b) \in \rho^{S_\alpha}$ для деякого $\alpha \in Y$.

Доведення. Нехай $(a;b) \in \mathfrak{L}^{S^0}$. Тоді $(a;b) \in \delta_l^{S^0}$ і $(b;a) \in \delta_l^{S^0}$. Звідси за лемою п.3.1 $(a;b) \in \delta_l^{S_\alpha}$ для деякого $\alpha \in Y$ та $(b;a) \in \delta_l^{S_\beta}$ для деякого $\beta \in Y$. Якщо $(a;b) \neq (0;0)$, то зрозуміло, що a,b належать одній ортогональній компоненті і, отже, $\alpha = \beta$. Таким чином, $(a;b) \in \mathfrak{L}^{S_\alpha}$. Якщо ж $(a;b) = (0;0)$, то теж $(a;b) \in \mathfrak{L}^{S_\alpha}$.

Припустимо тепер, що $(a;b) \in \mathfrak{L}^{S_\alpha}$ для деякого $\alpha \in Y$. Оскільки виконується умова $(S_\alpha)^1 a = (S_\alpha)^1 b$ та для всіх $c \in S^0 \setminus S_\alpha$ маємо $ca = 0 = cb$, то $(S^0)^1 a = (S^0)^1 b$, звідки $(a;b) \in \mathfrak{L}^{S^0}$.

Відмітимо, що аналогічно доводяться твердження для відношень $\mathfrak{R}^{S^0}, \mathfrak{J}^{S^0}$.

Нехай далі $(a;b) \in \mathfrak{D}^{S^0}$, де $(a;b) \neq (0;0)$. Тоді існує $c \in S^0$ такий, що $(a;c) \in \mathfrak{L}^{S^0}$ і $(c;b) \in \mathfrak{R}^{S^0}$. Звідси, за щойно доведеним, $(a;c) \in \mathfrak{L}^{S_\alpha}$ для деякого $\alpha \in Y$ та $(c;b) \in \mathfrak{R}^{S_\beta}$ для деякого $\beta \in Y$. Зрозуміло, що $c \neq 0$, і, отже, $\alpha = \beta$. Таким чином, $(a;b) \in \mathfrak{D}^{S_\alpha}$. Якщо $(a;b) = (0;0)$, то теж $(a;b) \in \mathfrak{D}^{S_\alpha}$.

Якщо $(a;b) \in \mathfrak{D}^{S_\alpha}$ для деякого $\alpha \in Y$, то існує $c \in S_\alpha$ такий, що $(a;c) \in \mathfrak{L}^{S_\alpha}$ і $(c;b) \in \mathfrak{R}^{S_\alpha}$. Звідси, за доведеним вище, маємо $(a;c) \in \mathfrak{L}^{S^0}$ і $(c;b) \in \mathfrak{R}^{S^0}$, звідки $(a;b) \in \mathfrak{D}^{S^0}$.

Аналогічно доводиться твердження для $\mathfrak{H}$ -еквівалентності Гріна.

Лему доведено.

4.2. З леми п.4.1 випливає

Наслідок. Нехай $S^0 = \sum_{\alpha \in Y} S_\alpha$ – ортогональна сума. Тоді для будь-якого $\rho \in \{\mathfrak{L},\mathfrak{R},\mathfrak{J},\mathfrak{D},\mathfrak{H}\}$

$$\rho^{S^0} = \bigcup_{\alpha \in Y} \rho^{S_\alpha},$$

при цьому $\rho^{S_i} \cap \rho^{S_j} = \{(0;0)\}$ для всіх $i, j \in Y$ таких, що $i \neq j$.

5. Трансверсалі відношень Гріна

В цьому параграфі описуються трансверсалі всіх відношень Гріна на довільній ортогональній сумі напівгруп.

5.1. Нехай ρ – відношення еквівалентності на напівгрупі S. Піднапівгрупа T напівгрупи S називається її *трансверсаллю* відносно ρ (або коротше, ρ *-трансверсаллю* S), якщо T містить в точності по одному елементу з кожного класу еквівалентності.

Підкреслимо, що більш 'цікавими' для досліджень є трансверсалі тих еквівалентностей, які пов'язані з напівгруповою операцією деякими властивостями. Першими претендентами на такі еквівалентності є відношення Гріна та конгруенції.

Якщо $\rho \subseteq X \times X$ – довільне відношення і $A \subseteq X$, то відношення $\rho|_A \subseteq A \times A$, що визначається умовою:

$$(x;y) \in \rho|_A \Leftrightarrow (x;y) \in \rho,$$

називається *обмеженням відношення* ρ на підмножину A множини X.

Теорема. Нехай S^0 – довільна ортогональна сума напівгруп $S_\alpha, \alpha \in Y$ і ρ – будь-яке відношення Гріна на напівгрупі S^0. Підмножина T напівгрупи S^0 є її ρ -трансверсаллю тоді й лише тоді, коли множина $T \cap S_\alpha$ є $\rho|_{S_\alpha}$ -трансверсаллю S_α для всіх $\alpha \in Y$.

Доведення. Нехай $T \subseteq S^0$ – трансверсаль деякого відношення Гріна ρ напівгрупи S^0. Зрозуміло, що множина $T \cap S_\alpha$ є піднапівгрупою напівгрупи S_α при будь-якому $\alpha \in Y$ і $|T \cap \mu| = 1$ для всіх $\mu \in S^0/\rho$. Беручи до уваги наслідок п.4.2, отримуємо, що $S^0/\rho = \bigcup_{\alpha \in Y} S_\alpha/(\rho|_{S_\alpha})$, звідки $|T \cap \mu| = 1$ для кожного $\mu \in S_\alpha/(\rho|_{S_\alpha})$ при довільному $\alpha \in Y$. Отже, множини $T \cap S_\alpha$, $\alpha \in Y$ є $\rho|_{S_\alpha}$-трансверсалями напівгруп S_α, $\alpha \in Y$.

Припустимо тепер, що $T \subseteq S^0$ – така множина, для якої $T \cap S_\alpha$ є $\rho|_{S_\alpha}$-трансверсаллю напівгрупи S_α для кожного $\alpha \in Y$. За наслідком п.4.2 для кожного відношення Гріна ρ напівгрупи S^0 матимемо $\rho = \bigcup_{\alpha \in Y} \rho|_{S_\alpha}$. Оскільки $T \cap S_\alpha$ є піднапівгрупою S_α при будь-якому $\alpha \in Y$ і для всіх $x \in T \cap S_i$ та $y \in T \cap S_j$, де $i, j \in Y, i \neq j$, маємо $xy = 0 \in T$ ($\{0\}$ є окремим класом кожної з еквівалентностей $\rho|_{S_\alpha}$, $\alpha \in Y$), то $T = \bigcup_{\alpha \in Y} (T \cap S_\alpha)$ є піднапівгрупою напівгрупи S^0. Беручи до уваги умову: $|T \cap S_\alpha \cap \mu| = 1$ для кожного $\mu \in S_\alpha/(\rho|_{S_\alpha})$ при будь-якому $\alpha \in Y$, дійдемо висновку, що $|T \cap \gamma| = 1$ для всіх $\gamma \in S^0/\rho$. Отже, T – ρ-трансверсаль напівгрупи S^0.

Теорему доведено.

5.2. Нехай $S^0 = \sum_{\alpha \in Y} S_\alpha$ – ортогональна сума і ρ – будь-яке відношення Гріна на напівгрупі S^0. Позначимо через $T_\alpha(\rho)$ множину всіх ρ-трансверсалей напівгрупи S_α, $\alpha \in Y$ і покладемо

$$T(\rho) = \bigcup_{\alpha \in Y} T_\alpha(\rho).$$

Визначимо відношення λ_ρ на множині $T(\rho)$, поклавши: $(A;B) \in \lambda_\rho$ тоді й лише тоді, коли $A, B \in T_\alpha(\rho)$ для деякого $\alpha \in Y$. Очевидно, λ_ρ – еквівалентність.

Підмножину $Q \subseteq T(\rho)$, що складається з елементів, узятих в точності по одному з кожного класу еквівалентності λ_ρ, назвемо *системою представників* відношення λ_ρ.

З теореми попереднього пункту отримуємо

Наслідок. Для будь-якого відношення Гріна ρ ортогональної суми S^0 та довільної системи представників Q еквівалентності λ_ρ множина $\bigcup_{A \in Q} A$ є ρ-трансверсаллю напівгрупи S^0. Навпаки, кожна ρ-трансверсаль напівгрупи S^0 отримується в такий спосіб.

5.3. Нехай T^0 – довільна напівгрупа з нулем. Відношення еквівалентності на напівгрупі T^0 називається 0-еквівалентністю, якщо $\{0\}$ є окремим її класом еквівалентності.

Неважко помітити, що будь-яке відношення Гріна на напівгрупі з нулем є 0-еквівалентністю.

Відмітимо, що результати цього параграфу залишаються вірними для будь-якої 0-еквівалентності на ортогональній сумі $S^0 = \sum_{\alpha \in Y} S_\alpha$, яка є об'єднанням довільних 0-еквівалентностей, взятих в точності по одній з кожної множини $Eq^0(S_\alpha), \alpha \in Y$ всіх 0-еквівалентностей напівгрупи S_α.

Висновки. В роботі отримано описання всіх трансверсалей $\mathfrak{L}$–, $\mathfrak{R}$–, $\mathfrak{J}$–, $\mathfrak{D}$– та $\mathfrak{H}$–еквівалентнос-тей Гріна на ортогональній сумі довільних напівгруп.

РЕЗЮМЕ

В работе получено описание трансверсалей всех отношений эквивалентности Грина на ортогональной сумме произвольных полугрупп.

SUMMARY

All $\mathfrak{L}$–, $\mathfrak{R}$–, $\mathfrak{J}$–, $\mathfrak{D}$– and $\mathfrak{H}$–cross-sections of the orthogonal sum of arbitrary semigroups are described.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Ляпин Е.С. Полупростые коммутативные ассоциативные системы // Известия АН СССР. – 1950. – №14. – С. 367-380.
2. Ляпин Е.С. Нормальные комплексы ассоциативных систем // Изв. АН СССР. – 1950. – 14. – С. 179-192.
3. Шварц Ш. О полугруппах имеющих ядро // Czech. Math. J. – 1951. – №1 (76). – С. 259-301.
4. Venkatesan P.S. On decomposition of semigroup with zero // Math. Zeitsch. – 1966. – 92. – P. 164-174.
5. Steinfeld S. On semigroups which are unions of completely o-simple semigroups // Czechoslovak Mathematical Journal. – 1966. – Vol. 16. – P. 63-69.
6. Bogdanović S., Ćirić M. Orthogonal sums of semigroups // Israel J. Math. – 1995. – 90. – P. 423-428.
7. Lallement G., Petrich M. Decomposition I-matricielles d'une demi-groupe // J. Math. Pures Appl. – 1966. – №45. – P.67-117.
8. Bogdanović S., Ćirić M. Decompositions of semigroups with zero // Publications de l'institut mathématique, Nouvelle série. – 1995. – №57 (71). – P. 111-123.
9. Жучок Ю.В. Декомпозиції напівгруп з нулем // Вісник Донецького нац. ун-ту. Сер. фіз-мат наук. – Донецьк, 2005. – № 2. – С. 7-13.
10. Zhuchok A. Automorphisms group of orthogonal sums of semigroups // 6th International Algebraic Conference in Ukraine, Abstracts (Jule, 1-7, 2007, Kamenetch-Podolskiy), p.252.
11. Cowan D.F., Reilly R. Partial cross-sections of symmetric inverse semigroups // International J. Algebra and Comput. 5 (1995), no. 3, 259-287.
12. Ganyushkin O., Mazorchuk V. $\mathfrak{L}$ – and $\mathfrak{R}$ – cross-sections in IS_n // Com. in Algebra, 31 (2003), no. 9, 4507-4523.
13. Pyekhtyeryev V. $\mathfrak{H}$ –, $\mathfrak{R}$ – and $\mathfrak{L}$ –cross-sections of the infinite symmetric inverse semigroup IS_X // J. Algebra and Discrete Mathematics, no. 1 (2005), 92-104.
14. Pyekhtyeryev V. $\mathfrak{H}$ – and $\mathfrak{R}$ –cross-sections of the full finite semigroup T_n // J. Algebra and Discrete Mathematics, no. 3 (2003), 82-88.
15. Kudryavtseva G., Maltsev V., Mazorchuk V. $\mathfrak{L}$ – and $\mathfrak{R}$ – cross-sections in the Brauer semigroup // U.U.D.M. Report 2004:43, Uppsala University, 2004.
16. Green J.A. On the structure of semigroups // Ann. of Math., №54 (1951), 163-172.
17. Клиффорд А., Престон Г. Алгебраическая теория полугрупп. – М.: Мир. – 1972. – Т.1. – 285 с.

Надійшла до редакції 20.11.2007 р.

УДК 517.5

УТОЧНЕНИЕ ТЕОРЕМЫ ДЗЯДЫКА О ГЕОМЕТРИЧЕСКОМ ОПИСАНИИ АНАЛИТИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ

О.А.Очаковская

Известная теорема В.К.Дзядыка о геометрическом описании аналитических функций утверждает, что для того чтобы функции u, v класса C^1 в области $\Omega \subset \mathbb{C}$ образовывали гармоническую пару, необходимо и достаточно, чтобы площади поверхностей графиков функций $u, v, \sqrt{u^2+v^2}$, расположенные над любым компактным подмножеством из Ω, были равны (см. [1]). Теорема В.К.Дзядыка позже уточнялась в следующем направлении: было установлено, что условие гармоничности пары u и v вытекает из равенства указанных выше площадей, расположенных над некоторыми семействами компактных подмножеств из Ω (см. [2, гл. 5, теорема 4.10]), [3], [4]. В данной работе рассматривается подобная задача для функций u, v класса C^1 в единичном круге $\mathbb{D} = \{z \in \mathbb{C} : |z| < 1\}$. В частности, показано, что утверждение теоремы В.К.Дзядыка остается верным, если равны площади поверхностей графиков $u, v, \sqrt{u^2+v^2}$, расположенных над кругами из заданного семейства, лежащими в $\mathbb{D}$.

Для формулировки основного результата введем ряд обозначений.

Рассмотрим гиперболическую плоскость, реализованную в виде круга $\mathbb{D} = \{z \in \mathbb{C} : |z| < 1\}$ с гиперболическим расстоянием

$$d(z_1, z_2) = \frac{1}{2} \ln \frac{|1 - \overline{z_1} z_2| + |z_2 - z_1|}{|1 - \overline{z_1} z_2| - |z_2 - z_1|}$$

между точками $z_1, z_2 \in \mathbb{D}$. Пусть o – центр круга $\mathbb{D}$.

Группа $SU(1,1)$ состоит из матриц вида $g = \begin{pmatrix} a & b \\ \overline{b} & \overline{a} \end{pmatrix}$, где $a, b \in \mathbb{C}$, $|a|^2 - |b|^2 = 1$, и действует на $\mathbb{D}$ посредством конформных отображений $gz = \frac{az+b}{\overline{b}z+\overline{a}}$, $z \in \mathbb{D}$. Нетрудно видеть, что для любых $z \in \mathbb{D}$, $g_1 = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ \overline{b_1} & \overline{a_1} \end{pmatrix} \in SU(1,1)$, $g_2 = \begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ \overline{b_2} & \overline{a_2} \end{pmatrix} \in SU(1,1)$ выполнено равенство $g_1 g_2 z = gz$, где g равно произведению матриц g_1 и g_2. Расстояние d и мера $d\mu(z) = \frac{dx\,dy}{(1-|z|^2)^2}$ инвариантны относительно $SU(1,1)$.

Пусть $r > 0$, $z \in \mathbb{D}$. Положим $K_r(z) = \{w \in \mathbb{D} : d(z,w) \le r\}$. Множество $K_r(z)$ называется *геодезическим кругом* радиуса r с центром в точке z.

Рассмотрим некоторые важные подгруппы группы $SU(1,1)$. Пусть

$$A = \left\{ a_t = \begin{pmatrix} ch\,t & sh\,t \\ sh\,t & ch\,t \end{pmatrix},\ t \in \mathbb{R}^1 \right\},\quad N = \left\{ n_s = \begin{pmatrix} 1+is & -is \\ is & 1-is \end{pmatrix},\ s \in \mathbb{R}^1 \right\}.$$

Орбитами группы A являются дуги окружностей, проходящих через точки –1 и 1, содержащиеся в круге $\mathbb{D}$. Орбитами группы N являются орициклы, т.е. окружности, содержащиеся в $\mathbb{D}$ и касающиеся границы $\mathbb{D}$ в точке $z = 1$.

Из определений A и d видно, что $d(o, a_t o) = d(o, tht) = t$, при всех $t \in \mathbb{R}^1$.

Кроме того, всякое $z \in \mathbb{D}$ имеет вид

$$z = n_s a_t o,$$

© Очаковская О.А.

где числа $s,\ t \in \mathsf{R}^1$ определяются однозначно и имеет место равенство

$$z = \frac{sht - ise^{-t}}{cht - ise^{-t}}.$$

Для любого $z = n_s a_t\, o \in \mathsf{D}$ мы положим $\langle z,1\rangle = t$. Аналогом полуплоскости в гиперболическом случае является множество

$$H_\alpha = \left\{ z = n_s a_t\, o : \langle z,1\rangle > \alpha, s \in \mathsf{R}^1 \right\},$$

где $\alpha \in \mathsf{R}^1$. Мы также положим $H_{-\infty} = \mathsf{D}$.

Пусть $r > 0$, $z \in \mathsf{C}$ и

$$\Phi_r(z) = 2ch\, r \int_{-r}^{r} e^{-izt} \sqrt{th^2 r\, ch^2 t - sh^2 t}\, dt.$$

Тогда функция Φ_r имеет бесконечно много нулей. Все нули функции Φ_r являются вещественными, простыми и расположены симметрично относительно точки $z = 0$ (см. [4]). Положим $N(r) = \{z > 0 : \Phi_r(z) = 0\}$.

Теорема. *Пусть* $\alpha \in [-\infty; +\infty)$, $r_1, r_2 > 0$ *фиксированы и* $N(r_1) \cap N(r_2) = \varnothing$. *Пусть также* $u, v \in C^1(H_\alpha)$. *Тогда для того, чтобы одна из функций* $u + iv$ *и* $u - iv$ *была голоморфна в* H_α *необходимо и достаточно, чтобы площади поверхностей графиков функций* $u, v, \sqrt{u^2 + v^2}$, *расположенные над любым геодезическим кругом* $K_r(z) \subset H_\alpha$, $r = r_1, r_2$ *были равны.*

Доказательство. Необходимость непосредственно следует из теоремы В.К.Дзядыка [1]. Докажем достаточность. Положим $u = g_1$, $v = g_2$, $\sqrt{u^2 + v^2} = g_3$. Рассмотрим функции

$$f_m(x,y) = (1 - |z|^2)^2 \left(1 + \left(\frac{\partial g_m}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial g_m}{\partial y}\right)^2\right)^{\frac{1}{2}}, \qquad m = 1,2,3. \tag{1}$$

Для любой функции g класса $C^1(K_r(z))$ площадь поверхности графика g, расположенного над $K_r(z)$ равна

$$\int_{K_r(z)} \left(1 + \left(\frac{\partial g}{\partial \xi}\right)^2 + \left(\frac{\partial g_m}{\partial \eta}\right)^2\right)^{\frac{1}{2}} d\xi\, d\eta =$$

$$= \int_{K_r(z)} \left(1 - |\varsigma|^2\right)^2 \left(1 + \left(\frac{\partial g}{\partial \xi}\right)^2 + \left(\frac{\partial g_m}{\partial \eta}\right)^2\right)^{\frac{1}{2}} d\mu(\varsigma), \tag{2}$$

где, как обычно, $\varsigma = \xi + i\eta$. Из условия теоремы следует, что

$$\int_{K_r(z)} f_1(\xi,\eta)\, d\mu(\varsigma) = \int_{K_r(z)} f_2(\xi,\eta)\, d\mu(\varsigma) = \int_{K_r(z)} f_3(\xi,\eta)\, d\mu(\varsigma) \tag{3}$$

для всех $K_r(z) \subset H_\alpha$ и $r = r_1, r_2$. Полагая $h_1(\varsigma) = f_2(\xi,\eta) - f_1(\xi,\eta)$, $h_2(\varsigma) = f_3(\xi,\eta) - f_1(\xi,\eta)$, из равенства (3) находим

$$\int_{K_r(z)} h_1(\varsigma)\, d\mu(\varsigma) = \int_{K_r(z)} h_2(\varsigma)\, d\mu(\varsigma) = 0 \tag{4}$$

для всех $K_r(z) \subset H_\alpha$ и $r = r_1, r_2$. Используя результат работы [5], из (4) получаем $h_1(z) = h_2(z) = 0$ в H_α. В силу определения h_1 и h_2 это означает, что $f_1 = f_2 = f_3$ в H_α. Тогда

$$\int_E f_1(\xi,\eta)\, d\mu(\varsigma) = \int_E f_2(\xi,\eta)\, d\mu(\varsigma) = \int_E f_3(\xi,\eta)\, d\mu(\varsigma) \qquad (5)$$

Учитывая равенство (1), (2) и (5) получаем, что площади поверхностей графиков $u, v, \sqrt{u^2+v^2}$, расположенные над E совпадают. Снова применяя теорему В.К.Дзядыка заключаем, что одна из функций $u \pm iv$ является голоморфной в H_α и теорема доказана.

РЕЗЮМЕ

Отримано уточнення теореми В.К.Дзядика про геометричний опис голоморфних функцій. Головний результат статті містить умови на площини поверхонь графіків функцій $u, v, \sqrt{u^2+v^2}$, що розташовані над наданою множиною куль, за якими одна з функцій $u \pm iv$ є голоморфною.

SUMMARY

A refinement of Dzyadyk's theorem on geometric description of holomorphic functions is obtained. The central result of the paper includes conditions for areas of the graphs of $u, v, \sqrt{u^2+v^2}$ lying over given families of disks under which one of the functions $u \pm iv$ is holomorphic.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дзядык В.К. Геометрическое определение аналитических функций // Успехи мат. наук. – 1960. – XV, вып. I. – С.191-194.
2. Volchkov V.V. Integral Geometry and Convolution Equations. – Kluwer Academic Publishers. Dordrecht / Boston / London. – 2003. – 454 p.
3. Волчков В.В. Преобразование Помпейю. Донецк: ДонГУ. – 1999. – 210 с.
4. Волчков В.В. Об одной экстремальной задаче, связанной с теоремой Мореры // Мат. Заметки. – 1996. – Т.60. – №6. – С.804-809.
5. Волчков В.В. Окончательный вариант локальной теоремы о двух радиусах на гиперболических пространствах // Известия РАН. – 2001 г. – Т.65. – №2. – С.3-26.

Надійшла до редакції 25.09.2007 р.

УДК 517.5

АППРОКСИМАЦИЯ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЙ СВЁРТКИ ЛИНЕЙНЫМИ КОМБИНАЦИЯМИ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ФУНКЦИЙ БЕССЕЛЯ

О.В.Резниченко

Вопросам, связанным с решением уравнения свертки, посвящено немало исследований. В одномерном случае решение уравнения свертки может быть получено в виде негармонического ряда Фурье [1]. В многомерной ситуации возникает ряд осложнений, например, существуют решения, которые нельзя представить в виде ряда по элементарным решениям. Тем не менее, для довольно широкого класса уравнений в последние годы получены аналоги разложений в ряд по собственным функциям некоторых связанных с уравнением дифференциальных операторов [1].

Основные результаты в этом направлении были получены Б. Мальгранжем, Л. Хёрмандером, В.П. Паламодовым, К.А. Беренстейном, А. Ижером, В.В. Волчковым, Вит.В. Волчковым. В связи с вышесказанным представляется актуальным исследовать скорость и характер аппроксимации данного решения уравнения свёртки линейными комбинациями его элементарных решений.

Напомним некоторые обозначения: $|\cdot|$ — евклидова норма в $\mathbb{R}^n$; ρ, σ — полярные координаты в $\mathbb{R}^n$ ($\forall x \in \mathbb{R}^n \quad \rho = |x|$, а если $x \neq 0$, то $\sigma = x/\rho$); $B_r = \{x \in \mathbb{R}^n : |x| < r\}$ при $0 < r \leq +\infty$; $\mathbb{S}^{n-1} = \{x \in \mathbb{R}^n : |x| = 1\}$; ω_{n-1} — площадь $\mathbb{S}^{n-1}$; $C^l(B_r)$ — множество непрерывно дифференцируемых на B_r функций порядка l; $O(n)$ — ортогональная группа в $\mathbb{R}^n$. Пусть $\mathcal{O} \subset \mathbb{R}^n$ — открытое множество, кроме описанных выше будут использованы следующие пространства: $\mathcal{D}(\mathcal{O})$ — пространство всех бесконечно дифференцируемых функций с компактным носителем в $\mathcal{O}$; $\mathcal{D}'(\mathcal{O})$ — пространство распределений на $\mathcal{O}$; $\mathcal{E}'(\mathcal{O})$ — пространство распределений с компактным носителем в $\mathcal{O}$. Пусть Y_j^k, $j = 1,\ldots,d(k)$ — фиксированный ортонормированный базис в $\mathcal{H}_k$ (пространство $\mathcal{H}_k$ рассматривается как подпространство $L^2(\mathbb{S}^{n-1})$), $\left\{t_{i,j}^k(\tau)\right\}$, $i,j = 1,\ldots,d(k)$, — матрица представления $T^k(\tau)$ для квазирегулярного представления $T(\tau)$ группы $O(n)$ на $L^2(\mathbb{S}^{n-1})$ в базисе Y_j^k.

В общем случае всякому распределению $f \in \mathcal{D}'(B_r)$ соответствует ряд Фурье

$$f \sim \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{d(k)} f^{k,j},$$

где распределения $f^{k,j}$ действуют по правилу $\langle f^{k,j}, \psi \rangle = \langle f, d(k) \int\limits_{O(n)} \psi(\tau^{-1}x) t_{j,j}^k(\tau) d\tau \rangle$, $\psi \in D(B_r)$.

Положим

$$\mathcal{E}'_{k,j} = \left\{ f \in \mathcal{E}'(B_r) : f = f^{k,j} \right\},$$

$$C^{\nu}_{k,j} = \left\{ f \in C^{\nu}(B_r) : f = f^{k,j} \right\},$$

$$\operatorname{conj}\left(\mathcal{E}'_{k,j}(B_r)\right) = \left\{ \overline{T} : T \in \mathcal{E}'_{k,j}(B_r) \right\}.$$

Пусть также $\mathfrak{M}(-a,a)$, $0 < a \leq +\infty$ — некоторый класс распределений из $\mathcal{D}'(-a,a)$. Тогда $\mathfrak{M}_{\natural}(-a,a)$ обозначает класс всех четных распределений из $\mathfrak{M}(-a,a)$.

В работе [2] для $\lambda \in C$ были введены функции:

$$\Phi_{\lambda,\eta,k,j}(x) = 2^{n/2-1}\Gamma(n/2)\sqrt{\omega_{n-1}}\rho^k \left(\frac{\partial}{\partial z}\right)^{\eta} \left(\mathbf{I}_{n/2+k-1}(z\rho)\right)\Big|_{z=\lambda} Y_j^k(\sigma), \quad x \in \mathrm{R}^n \setminus \{0\}, \tag{1}$$

© Резниченко О.В.

где $\varkappa = \eta$, если $\lambda \neq 0$, $\varkappa = 2\eta$, если $\lambda = 0$, $\mathbf{I}_\nu(\lambda) = J_\nu(\lambda)/\lambda^\nu$, J_ν — функция Бесселя первого рода порядка ν.

Кроме того, в [2] для $f \in \mathcal{E}'_{k,j}(\mathbb{R}^n)$ и $\psi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^1)$ были определены операторы:

$$\left\langle \mathfrak{A}_{k,j}(f), \psi \right\rangle = \frac{(\omega_{n-1})^{-1}}{2^{n-2}\Gamma^2(n/2)} \int_0^\infty \lambda^{n+2k-1} \mathcal{F}_j^k(f)(\lambda) \int_{\mathbb{R}^n} \psi(t)\cos(\lambda t)dtd\lambda, \tag{2}$$

где $\mathcal{F}_j^k(f)(z) = \langle f, \overline{\Phi_{z,0,k,j}} \rangle$ ($z \in \mathbb{C}$) — преобразование Ганкеля распределения f, и для $F \in \mathcal{E}'_\natural(\mathbb{R}^1)$:

$$\left\langle \mathfrak{B}_{k,j}(F), w \right\rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \hat{F}(\lambda)\langle w, \Phi_{\lambda,0,k,j}\rangle d\lambda, \qquad w \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n) \tag{3}$$

Также в [2] было доказано, что для распределения $T \in \mathrm{conj}\left(\mathcal{E}'_{k,j}(\mathbb{R}^n)\right)$ порядка l существует единственное распределение $\Lambda^{k,j}(T) \in \mathcal{E}'_\natural(\mathbb{R}^1)$ порядка не выше $\max\{0,l-k+2\}$ такое, что

$$\widehat{\Lambda^{k,j}(T)}(\lambda) = \overline{\mathcal{F}_j^k(\bar{T})(\bar{\lambda})} = \langle T, \Phi_{\lambda,0,k,j}\rangle, \ \lambda \in \mathbb{C}.$$

В дальнейшем отображение $\Lambda^{0,1} : \mathcal{E}'_\natural(\mathbb{R}^n) \to \mathcal{E}'_\natural(\mathbb{R}^1)$ будет обозначаться Λ.

В данной работе будет рассмотрен случай $k = 0$, $j = 1$, тогда (1) – (3) примут вид:

$$\Phi_{\lambda,0,0,1}(x) = 2^{n/2-1}\Gamma(n/2)\frac{J_{n/2-1}(\lambda\rho)}{(\lambda\rho)^{n/2-1}}\sqrt{\omega_{n-1}}Y_1^0(\sigma) = 2^{n/2-1}\Gamma(n/2)\frac{J_{n/2-1}(\lambda\rho)}{(\lambda\rho)^{n/2-1}}; \tag{4}$$

$$\langle \mathfrak{A}_{0,1}(f), \psi \rangle = \frac{(\omega_{n-1})^{-1}}{2^{n-2}\Gamma^2(n/2)} \int_0^\infty \lambda^{n-1} \langle f, \overline{\Phi_{\bar{z},0,0,1}} \rangle \int_{\mathbb{R}^n} \psi(t)\cos(\lambda t)dtd\lambda; \tag{5}$$

$$\left\langle \mathfrak{B}_{0,1}(F), w \right\rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \hat{F}(\lambda)\langle w, \Phi_{\lambda,0,0,1}\rangle d\lambda, \qquad w \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n) \tag{6}$$

Для краткости обозначим $\mathfrak{A} = \mathfrak{A}_{0,1}$, $\mathfrak{B} = \mathfrak{B}_{0,1}$ и в дальнейшем будем считать, что $R > \pi$.

Рассмотрим уравнение свертки

$$f * T = 0, \tag{7}$$

где $T \in \mathcal{E}'_{0,1}(\mathbb{R}^n)$ — заданное распределение, удовлетворяющее условию

$$\mathcal{F}_0^1(T)(z) = \frac{\sin \pi z}{z},$$

и функция f удовлетворяет следующим условиям

$$f \in C^l(B_R), \ R > \pi, \ l \geq n+4, \ f(x) = f^{0,1}(\rho), \ x \in B_R. \tag{8}$$

Основным результатом работы является следующая

Теорема 1. *Пусть функция f удовлетворяет условиям (7), (8). Тогда при любом натуральном N можно построить полином по модифицированным функциям Бесселя порядка не выше N с коэффициентами $\{\gamma_i\}_{i=1}^N$, $\gamma_i \in \mathbb{C}$ $(i = \overline{1,\mathbb{N}})$, для которого*

$$\left\| f(x) - \sum_{m=1}^N \gamma_m \frac{J_{n/2-1}(m\rho)}{(m\rho)^{n/2-1}} \right\|_{L_1(B_R)} = o\left(\frac{1}{N^{l-n-4}}\right) \text{ при } N \to +\infty. \tag{9}$$

Для доказательства основной теоремы понадобятся две следующие леммы о свойствах операторов $\mathfrak{A}$ и $\mathfrak{B}$ [2].

Лемма 1. *При $R \in (0,+\infty]$, $N \in \mathbb{Z}_+$ и $\nu = N+n+k+2$ имеют место следующие утверждения.*

(i) Если $f \in C^\nu_{k,j}(B_R)$, то $\mathfrak{A}_{k,j}(f) \in C^N_\natural(-R,R)$.

(ii) При $\lambda \in \mathbb{C}$ и $\mu \in \mathbb{Z}_+$

$$\mathfrak{A}_{k,j}(\Phi_{\lambda,\mu,k,j})(t)=\begin{cases}\dfrac{(it)^{\mu}e^{i\lambda t}+(-it)^{\mu}e^{-i\lambda t}}{2}, & \lambda\neq 0\\ (-1)^{\mu}t^{2\mu}, & \lambda=0.\end{cases} \tag{10}$$

(iii) Для $f\in\mathcal{E}'_{k,j}(\mathbb{R}^n)$ *и* $T\in\mathcal{E}'_{\natural}(\mathbb{R}^n)$ *справедливо соотношение*

$$\mathfrak{A}_{k,j}(f*T)=\mathfrak{A}_{k,j}(f)*\Lambda(T).$$

Лемма 2. Для $R\in(0,+\infty]$, $s\in\{2,3,...\}$ справедливы следующие утверждения.

(i) Если $F\in C^s_{\natural}(-R,R)$, *то* $\mathfrak{B}_{k,j}(F)\in C^{s+k-2}_{k,j}(B_R)$.

(ii) Если $F\in\mathcal{D}'_{\natural}(-R,R)$, *то* $\mathfrak{A}_{k,j}\left(\mathfrak{B}_{k,j}F\right)=F$.

(iii) Пусть $r\in(0,+\infty)$. *Тогда существует константа* $c>0$ *такая, что для всех* $N\in\mathbb{Z}_+$ *и* $G\in C^{2N+2}_{\natural}[-r,r]$

$$\int_{B_r}\left|\Delta^N\left(\mathfrak{B}_{k,j}(G)\right)(x)\right|dx\le c\int_{-r}^{r}\left(\left|G^{(2N)}(t)\right|+\left|G^{(2N+2)}(t)\right|\right)dt. \tag{11}$$

В.Н. Малозёмовым (см. [3]) был получен следующий результат о совместном приближении функции и ее производных тригонометрическим полиномом:

Лемма 3. *Если* $g\in C^r[-R,R]$, $R\ge\pi$ *и* 2π *- периодична, то при любом натуральном* n *можно построить тригонометрический полином* T_n *порядка не выше* n, *для которого при всех* $s\in[0,r]$ *будет выполняться неравенство*

$$\left\|g^{(s)}-T_n^{(s)}\right\|_{C[-R,R]}\le\frac{A_r\omega\left(g^{(r)};1/n\right)}{n^{r-s}}, \tag{12}$$

где константа A_r *зависит только от* r *и* $\omega\left(g^{(r)};1/n\right)$ *— модуль непрерывности функции* $g^{(r)}$.

Замечание 1. *Если при условиях леммы 3 функция* f *является чётной, то полином* T_n *тоже можно выбрать чётным, то есть,* $T_n=\sum_{m=1}^{n}c_m\cos mt$, $c_m\in\mathbb{C}$. *Кроме того, если* $\int_{-\pi}^{\pi}f(t)dt=0$, *то* c_0 *можно считать равным нулю.*

Доказательство теоремы 1. Пусть f удовлетворяет условиям (7), (8). Введем функцию

$$F(\rho)=f(x)-\sum_{m=1}^{N}c_m\frac{J_{n/2-1}(m\rho)}{(m\rho)^{n/2-1}},\ \text{где}\ c_m\in\mathbb{C}. \tag{13}$$

Под действием оператора $\mathfrak{A}$ формула (13) примет вид:

$$\mathfrak{A}(F)=\mathfrak{A}(f)-\mathfrak{A}\left(\sum_{m=1}^{N}c_m\frac{J_{n/2-1}(m\rho)}{(m\rho)^{n/2-1}}\right). \tag{14}$$

Из (5) находим:

$$\frac{J_{n/2-1}(\lambda\rho)}{(\lambda\rho)^{n/2-1}}=\alpha_1\Phi_{\lambda,0,0,1}, \tag{15}$$

где $\alpha_1=\dfrac{2^{n/2-1}}{\Gamma(n/2)}$.

Подставляя (15) в (14), получим:

$$\mathfrak{A}(F)=\mathfrak{A}(f)-\mathfrak{A}\left(\sum_{m=1}^{N}c_m\alpha_1\Phi_{m,0,0,1}\right). \tag{16}$$

По лемме 1(ii)

$$\mathfrak{A}(\Phi_{\lambda,0,0,1})(t)=\frac{e^{i\lambda t}+e^{-i\lambda t}}{2}=\cos\lambda t,$$

тогда (16) примет вид:

$$\mathfrak{A}(F)=\mathfrak{A}(f)-\alpha_1\sum_{m=1}^{N}c_m\cos mt. \tag{17}$$

Действуя на (17) оператором $\mathfrak{B}$ и учитывая пункт (ii) леммы 2, получим

$$\mathfrak{B}\big(\mathfrak{A}(F)\big)=F=f-\sum_{m=1}^{N}c_m\frac{J_{n/2-1}(m\rho)}{(m\rho)^{n/2-1}}.$$

Применяя (11) при $N=0$, $c=\alpha_2$ для функции $G=\mathfrak{A}(F)$, имеем

$$\int_{B_R}\left|\mathfrak{B}(\mathfrak{A}(F))(x)\right|dx\le\alpha_2\int_{-R}^{R}\left(\left|\mathfrak{A}(F)(t)\right|+\left|\mathfrak{A}''(F)(t)\right|\right)dt. \tag{18}$$

По пункту (i) леммы 1 $\mathfrak{A}(F)\in C_{\natural}^{l-n-2}(-R,R)$, $l\ge n+4$, то есть порядок гладкости $\mathfrak{A}(F)$ не меньше 2. Используя замечание 1, выберем теперь константы $c_m\in\mathbb{C}$ так, чтобы тригонометрический полином $T_N=\sum_{m=1}^{N}\alpha_1c_m\cos mt$ удовлетворял условиям леммы 3 для $g=\mathfrak{A}(F)$ (см. также лемму 1 (iii)).

Тогда, применяя (12) для $s=0$ и $s=2$ к функции $g=\mathfrak{A}(F)$, получим соответственно:

$$\left\|\mathfrak{A}(F)(t)\right\|_{C[-R,R]}=\left|\mathfrak{A}(F)(t)\right|\le\frac{A_l\omega\left(\mathfrak{A}^{(l-n-2)}(f);1/N\right)}{N^{l-n-2}}$$

и

$$\left\|\mathfrak{A}''(F)(t)\right\|_{C[-R,R]}=\left|\mathfrak{A}''(F)(t)\right|\le\frac{A_l\omega\left(\mathfrak{A}^{(l-n-4)}(f);1/N\right)}{N^{l-n-4}}.$$

Применим к правой части (18) следующее свойство непрерывных функций: если функция $f(t)\in C[-r,r]$ ограничена: $|f(t)|\le C$, то $\int_{-r}^{r}|f(t)|\,dt\le C\cdot 2r$. Отсюда получим

$$\int_{-R}^{R}\left|\mathfrak{A}^{(s)}(F)(t)\right|\le\frac{2RA_l\omega\left(\mathfrak{A}^{(l-n-2)}(f);1/N\right)}{N^{l-n-2-s}}, \tag{19}$$

где $s\in\{0,2\}$.

Подставляя (19) в (18), получаем:

$$\left\|F(\rho)\right\|_{L_1(B_R)}=\int_{B_R}|F(\rho)|\,d\rho=o\left(\frac{1}{N^{l-n-4}}\right)\text{ при }N\to+\infty. \tag{20}$$

где $F(\rho)$ задано равенством (13), что и требовалось доказать.

Замечание 1. Более точная оценка в (20) получится, если не пренебрегать константами из (19), то есть

$$\left\|f(x)-\sum_{m=1}^{N}c_m\frac{J_{n/2-1}(m\rho)}{(m\rho)^{n/2-1}}\right\|_{L_1(B_R)}\le 2RA_l\omega\left(\mathfrak{A}^{(l-n-2)}(f);1/N\right)\frac{N^2+1}{N^{l-n-2}}.$$

Следствие 1. Пусть

$$f(x)=\frac{J_{n/2-1}(N\rho)}{(N\rho)^{n/2-1}}, \qquad N\in\mathbb{N}.$$

Тогда

$$\left\|\frac{J_{n/2-1}(N\rho)}{(N\rho)^{n/2-1}}-\sum_{m=1}^{N-1}c_m\frac{J_{n/2-1}(m\rho)}{(m\rho)^{n/2-1}}\right\|_{L_1(B_R)}=o\left(\frac{1}{N^{l-n-4}}\right) \quad \textbf{при} \quad N\to+\infty.$$

РЕЗЮМЕ

У роботі досліджується швидкість апроксимації заданого розв'язку рівняння згортки лінійними комбінаціями його елементарних розв'язків.

SUMMARY

The rate of approximation of solutions for convolution equations by linear combinations its elementary solutions is investigated.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Volchkov V.V. Integral geometry and convolution equations. – Dordrecht-Boston-London: Kluwer Acad. Publ., 2003.
2. Волчков В.В., Волчков Вит.В. Об отображениях со свойством обобщенной трансмутации // Труды ИПММ НАН Украины. 2006. – Вып. 13. – С. 31-38.
3. Малозёмов В.Н. Совместное приближение функции и ее производных. – Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1973. – 112 с.

Надійшла до редакції 08.10.2007 р.

УДК 517.954

НЕТРИВИАЛЬНАЯ РАЗРЕШИМОСТЬ ОДНОРОДНОЙ ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ В КРУГЕ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ПОРЯДКА $2m$ В СЛУЧАЕ ХАРАКТЕРИСТИК, НЕ ИМЕЮЩИХ УГЛОВ НАКЛОНА

Е.А.Буряченко

Введение. Целью данной работы является получение критерия нетривиальной разрешимости однородной задачи Дирихле в единичном круге K для общего уравнения четного порядка $2m$, $m > 2$, хотя бы одна из характеристик которого не имеет угла наклона:

$$L(\partial_x)u = a_0 \frac{\partial^{2m}u}{\partial x_1^{2m}} + a_1 \frac{\partial^{2m}u}{\partial x_1^{2m-1}\partial x_2} + \cdots + a_{2m-1} \frac{\partial^{2m}u}{\partial x_1 \partial x_2^{2m-1}} + a_{2m} \frac{\partial^{2m}u}{\partial x_2^{2m}} = 0, \tag{1}$$

$$u|_{\partial K} = 0,\ u'_\nu|_{\partial K} = 0,\ \ldots,\ u_\nu^{(m-1)}|_{\partial K} = 0, \tag{2}$$

где $\vec{\nu}$ – единичный вектор внешней нормали, $\partial_x = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}\right)$ – вектор-градиент, $a_i \in C, i = 0,1,\ldots,2m$. В работе [1] был получен критерий нетривиальной разрешимости задачи (1), (2) для уравнений главного типа [2, с. 48], т.е. в случае, когда корни характеристического уравнения $L(1, \lambda) = 0$ простые и не равны $\pm i$.

Напомним [1], что *углом наклона характеристики*, отвечающей корню λ_j характеристического уравнения $L(1, \lambda) = 0$ называется некоторое решение φ_j уравнения $-tg\varphi_j = \lambda_j$, $j = 1,\ldots,2m$. Углом между i – той и j – той характеристикой назовем разность $\varphi_{ij} = \varphi_i - \varphi_j, i \neq j$.

Вопросы тривиальности ядра задачи Дирихле в так называемых исключительных случаях, когда некоторые характеристики уравнения не существуют ($\exists\, k^* : \lambda_{k^*} = \pm i$) и (или) кратны для общих уравнений второго порядка были рассмотрены А.В. Бицадзе [3] и Бурским В.П. [4], а для уравнений четвертого порядка Буряченко Е.А. [5], Товмасяном Н.Э. [6], Бабаяном А.Н. [7]. Причем в работе [5] полностью решен вопрос о получении критериев нетривиальной разрешимости задачи Дирихле и установлена зависимость между значением кратности корней характеристического уравнения и существованием нетривиального решения соответствующей задачи. В настоящей работе обобщены результаты статей [1] и [5] для общего дифференциального уравнения (1) произвольного четного порядка $2m$, $m > 2$, с постоянными комплексными коэффициентами для случая, когда существуют корни характеристического уравнения, равные $\pm i$, т.е. соответствующие им характеристики не имеют углов наклона (см. определение выше). Установлена зависимость между значением кратности корней $\pm i$ характеристического уравнения и существованием нетривиального решения задачи (1), (2) в пространстве $C^{2m}(\overline{K})$.

1. Двойственность уравнение-область. Качественные свойства решений общих граничных задач для дифференциальных уравнений в частных производных зависят от области, в которой рассматривается задача. Аналитически установить эту зависимость удалось в монографии [8, с. 199], в которой автором был разработан метод двойственности уравнение-область, позволяющий без больших технических сложностей исследовать общие граничные задачи для бестипных линейных дифференциальных уравнений произвольного порядка в полуалгебраических областях. Суть метода заключается в следующем.

Пусть $\Omega \subset R^n$ – ограниченная полуалгебраическая область, заданная неравенством $\Omega = \{x \in R^n : P(x) > 0\}$ с некоторым вещественным эллиптическим полиномом $P(x)$. Уравнение $P(x) = 0$ задает границу $\partial\Omega$. предполагается, что граница области невырождена, т.е. $|\nabla P| \neq 0$ на $\partial\Omega$. Рассмотрим следующую граничную задачу для бестипного линейного уравнения с постоянными коэффициентами порядка l:

$$L(D)u = \sum_{|\alpha| \le l} a_\alpha D^\alpha u = 0,\ u|_{\partial\Omega} = 0,\ u'_\nu|_{\partial\Omega} = 0, \ldots,\ u_\nu^{(\gamma-1)}|_{\partial\Omega} = 0,\ \gamma \le l. \tag{3}$$

Под двойственностью уравнение-область понимается соответствие между задачей (3) и уравнением

$$P(-D_\xi)^{l-\gamma}\{L(\xi)w(\xi)\} = 0, \tag{4}$$

отмеченное в следующем утверждении:

© Буряченко Е.А.

Утверждение 1 [8, с. 199-200]. Для каждого нетривиального решения задачи (3) из пространства $C^l(\overline{\Omega})$ существует нетривиальное аналитическое в C^n решение уравнения (4) из некоторого класса Z целых функций и наоборот: каждому ненулевому решению $w(\xi) \in Z$ уравнения (4) отвечает ненулевое решение $u \in C^l(\overline{\Omega})$ задачи (3).Класс Z здесь определен как пространство образов Фурье функций вида: $\Theta_\Omega v,\ v \in C^l(R^n), \Theta_\Omega$ – характеристическая функция области Ω.

Если L – оператор второго порядка с простыми характеристиками, то двойственной задачей к задаче Дирихле $L(D_x)u = 0,\ u|_{P(x)=0} = 0$ будет задача $P(-D_\xi)w = 0,\ w|_{L(\xi)=0} = 0,$ в некотором пространстве целых функций. Здесь ξ – двойственная переменная. Утверждение 1 позволяет установить изоморфизм между произвольным решением граничной задачи (3) из пространства $C^l(\overline{\Omega})$ и аналитическим из C^n решением соответствующей двойственной задачи, а также свести вопрос разрешимости краевых задач для бестипных уравнений к аналогичным вопросам, но уже для эллиптических уравнений, возможно, менее сложной структуры и низкого порядка.

2. Формулировка основного результата. Случай простых корней. В силу разложения символа уравнения (1) $L(\xi) = a_0\xi_1^{2m} + a_1\xi_1^{2m-1}\xi_2 + \ldots + a_{2m-1}\xi_1\xi_2^{2m-1} + a_{2m}\xi_2^{2m} = <\xi, a^1> <\xi, a^2> \times \cdots \times <\xi, a^{2m-1}> <\xi, a^{2m}>$, уравнение (1) перепишем в виде:

$$<\nabla, a^1> <\nabla, a^2> <\nabla, a^3> \cdots <\nabla, a^{2m-1}> <\nabla, a^{2m}> u = 0, \tag{5}$$

где $a^j \in C^2, j = 1,2,\ldots,2m$ - комплексные векторы, определяемые комплексными коэффициентами уравнения (1), $<a,b> = a_1\overline{b}_1 + a_2\overline{b}_2$ – скалярное произведение векторов $a, b \in C^2$. В дальнейшем будем рассматривать также векторы $\widetilde{a}^j = (-\overline{a}_2^j, \overline{a}_1^j) = (-\cos\varphi_j, \sin\varphi_j),\ j = 1,2,\ldots,2m.$

Предположим, что для некоторого $k = 1,\ldots,2m,\ \lambda_k = i$ – корень характеристического уравнения $L(1, \lambda) = 0$, тогда, $\overline{a}_1^k + i\overline{a}_2^k = 0,$ следовательно, $\overline{a}_1^k = -i\overline{a}_2^k$ и k – множитель в разложении символа $L(\xi)$ уравнения (1) приобретает вид : $\xi_1\overline{a}_1^k + \xi_2\overline{a}_2^k = \overline{a}_2^k(-i\xi_1 + \xi_2) = -i\overline{a}_2^k(\xi_1 + i\xi_2)$, т.е. с точностью до множителя равен $\xi_1 + i\xi_2$, что и будем использовать в дальнейшем. Аналогично для корня $-i : \xi_1 - i\xi_2$.

Рассмотрим ситуацию, когда все корни характеристического уравнения простые, а некоторые из них равны $\pm i$. В этом случае справедлива следующая теорема.

Теорема 1. 1. Предположим, что все корни характеристического уравнения $L(1, \lambda) = 0$ различны, однако, один из них (λ_1, например) равен i $(-i)$. Тогда для нетривиальной разрешимости задачи Дирихле (1), (2) в $C^{2m}(\overline{K})$, необходимо и достаточно выполнения следующего условия для некоторого $n \in N,\ n \geq 2m$:

$$\det \begin{pmatrix} 1 & i(-i) & \cdots & 0 & 0 \\ \cos n\varphi_2 & \sin n\varphi_2 & \cdots & \cos(n-2(m-1))\varphi_2 & \sin(n-2(m-1))\varphi_2 \\ \cos n\varphi_3 & \sin n\varphi_3 & \cdots & \cos(n-2(m-1))\varphi_3 & \sin(n-2(m-1))\varphi_3 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \cos n\varphi_{2m} & \sin n\varphi_{2m} & \cdots & \cos(n-2(m-1))\varphi_{2m} & \sin(n-2(m-1))\varphi_{2m} \end{pmatrix} = 0. \tag{6}$$

При выполнении этого условия существует нетривиальное полиномиальное решение задачи (1), (2).

2. Если все корни характеристического уравнения различны, но среди них есть корни, равные i и $-i$ (пусть, например, $\lambda_1 = i,\ \lambda_2 = -i$), то необходимым и достаточным условием существования нетривиального решения задачи (1), (2) в $C^{2m}(\overline{K})$ является выполнение равенства для некоторого $n \in N,\ n \geq 2m$:

$$\det\begin{pmatrix} \cos(n-2)\varphi_3 & \sin(n-2)\varphi_3 & \cdots & \cos(n-2(m-1))\varphi_3 & \sin(n-2(m-1))\varphi_3 \\ \cos(n-2)\varphi_4 & \sin(n-2)\varphi_4 & \cdots & \cos(n-2(m-1))\varphi_4 & \sin(n-2(m-1))\varphi_4 \\ & & \cdots & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \cos n\varphi_{2m} & \sin n\varphi_{2m} & \cdots & \cos(n-2(m-1))\varphi_{2m} & \sin(n-2(m-1))\varphi_{2m} \end{pmatrix} = 0, \qquad (7)$$

при выполнении которого существует полиномиальное решение задачи.

Замечание 1. В случае, если одновременно существуют корни i и $-i$, то оператор L порядка $2m$ можно разложить в виде произведения оператора Лапласа и оператора порядка $2(m-1)$: $L = \Delta \cdot L_{2m-2}$. Вторая часть теоремы 1 свидетельствует о том, что с точки зрения единственности решения задачи Дирихле для оператора L, правильно эллиптическая часть (оператор Лапласа) значения не имеет и такие уравнения ведут себя как и уравнения порядка $2(m-1)$, поскольку условие (7), согласно результатам работы [1], является критерием нарушения единственности решения задачи Дирихле в круге для уравнений главного типа порядка $2(m-1)$.

Доказательство. 1). *Необходимость.* Для определенности, рассмотрим случай $\lambda_1 = i$, доказательство для $\lambda_1 = -i$ аналогично. Согласно утверждению 1, существование нетривиального решения задачи Дирихле (1), (2) в пространстве $C^{2m}(\overline{K})$ влечет существование нетривиального аналитического в C^2 решения $w(\xi) \in Z$ уравнения:

$$(\Delta_\xi + 1)^m \{L(\xi) \cdot w(\xi)\} = 0. \qquad (8)$$

Раскладывая функцию $w(\xi)$ в степенной ряд, для младшей нетривиальной однородной полиномиальной части $\tilde{v}(\xi) = L(\xi)\tilde{w}(\xi)$ ряда $v(\xi) = L(\xi)w(\xi)$ получим уравнение:

$$\Delta_\xi{}^m \tilde{v}(\xi) = 0. \qquad (9)$$

Из соотношений (32.15)-(32.22) в [9] или из формулы Альманси [10, с.208] общее полиномиальное решение уравнения (9) можно записать в виде:

$$\tilde{v}(\xi) = \mathrm{Re}\{f_1(z) + \ldots + \bar{z}^{m-1} f_m(z)\} + i\,\mathrm{Re}\{g_1(z) + \ldots + \bar{z}^{m-1} g_m(z)\},$$

где $z = \xi_1 + i\xi_2$, $f_i(z) = \sum f_{in} z^n$, $g_i(z) = \sum g_{in} z^n$, $i = 1,2,\ldots,m-$ некоторые полиномы. Переходя к тригонометрической записи комплексного числа $z = \rho \cdot e^{i\varphi}$, получим:

$$v(\rho,\varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \rho^n (\alpha_{1n}\cos n\varphi - \beta_{1n}\sin n\varphi + \alpha_{2n}\cos(n-2)\varphi - \beta_{2n}\sin(n-2)\varphi + \cdots +$$

$$\alpha_{mn}\cos(n-2(m-1))\varphi - \beta_{mn}\sin(n-2(m-1))\varphi). \qquad (10)$$

Здесь постоянные α_{in}, β_{in} строятся по коэффициентам разложения полиномов $f_i(z) = \sum f_{in} z^n$, $g_i(z) = \sum g_{in} z^n$, $i = 1,2,\ldots,m$ следующем образом:

$\mathrm{Re}\,\alpha_{in} = \mathrm{Re}\, f_{i,n-(i-1)}$, $\mathrm{Im}\,\alpha_{in} = \mathrm{Re}\, g_{i,n-(i-1)}$, $\mathrm{Re}\,\beta_{in} = \mathrm{Im}\, f_{i,n-(i-1)}$, $\mathrm{Im}\,\beta_{in} = \mathrm{Im}\, g_{i,n-(i-1)}$, $n \in N, i = 1,\ldots,m$.

Используя формулы Эйлера: $\cos z = \dfrac{e^{iz} + e^{-iz}}{2}$, $\sin z = \dfrac{e^{iz} - e^{-iz}}{2i}$, из (10) получим:

$$v(\rho,\varphi) = \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{\infty} \rho^n \left\{ \sum_{j=1}^{m} \left(\alpha_{jn} - \frac{\beta_{jn}}{i} \right) e^{i(n-2(j-1))\varphi} + \left(\alpha_{jn} + \frac{\beta_{jn}}{i} \right) e^{-i(n-2(j-1))\varphi} \right\}. \qquad (11)$$

Поскольку при делении целой функции $\tilde{v}(\xi) = L(\xi)\tilde{w}(\xi)$ на символ $(\xi_1 + i\xi_2) < \xi, a^2 > < \xi, a^3 > \cdots < \xi, a^{2m-1} > < \xi, a^{2m} >$ должен получиться полином, с необходимостью получаем:

$$\alpha_{1n} + i\beta_{1n} = 0,\ \tilde{v}\,|_{\varphi=-\varphi_2} = 0,\ \tilde{v}\,|_{\varphi=-\varphi_3} = 0,\ \cdots,\ \tilde{v}\,|_{\varphi=-\varphi_{2m}} = 0. \qquad (12)$$

Здесь также использовался тот факт, что $\xi_1 + i\xi_2 = \rho e^{i\varphi}$, а условие $< \xi, a^j >= 0$ эквивалентно равенству $\varphi = -\varphi_j$, $j = 2,3,\ldots 2m$.

Подставляя (11) в (12) приходим к системе линейных уравнений относительно постоянных α_{in}, β_{in} с определителем, стоящим в левой части равенства (6). Поскольку двойственная задача (8) имеет

нетривиальное решение, то существует ненулевой набор постоянных α_{in}, β_{in}, $n = 1,2,...,m$. Значит, линейная система обладает ненулевым решением, что влечет обращение в нуль её определителя, т.е. выполнение условия (6).

Достаточность. При выполнении условия (6) для некоторого $n \in N$, $n \geq 2m$, построим нетривиальное решение задачи (1), (2) в явном виде. Тем самым, будет доказана достаточность условия (6) для нетривиальной разрешимости задачи (1), (2). В силу $\lambda_1 = i$, уравнение (5) приобретает вид:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_1} + i\frac{\partial}{\partial x_2}\right) < \nabla, a^2 >< \nabla, a^3 > \cdots < \nabla, a^{2m-1} >< \nabla, a^{2m} > u = 0,$$

и ему, вследствие ортогональности векторов a^j и $\tilde{a}^j$ при каждом $j = 2,...,2m$, удовлетворяет функция вида:

$$u(x) = \frac{C_1}{2n}(x_1 + ix_2)^n + \sum_{j=2}^{2m} C_j F_j(-\tilde{a}^j \cdot x) + C_2 < x, a^1 > F_2(-\tilde{a}^1 \cdot x). \qquad (13)$$

Здесь $F_j(y)$ – некоторые гладкие функции одного аргумента, C_j – постоянные, $j = 1,2,...,2m$. Для построения нетривиального решения задачи (1), (2) нам необходимо так подобрать функции $F_j(-\tilde{a}^j \cdot x)$, чтобы (13) удовлетворяла граничным условиям (2) для некоторого ненулевого набора постоянных C_j. В работе [1] было доказано, что в качестве $F_j(y)$ можно взять функцию, являющуюся с точностью до постоянной *(m-1)*-й первообразной полинома Чебышева первого рода порядка $N = n - m + 1$ [11]:

$$F_j(y) = F_{m-1}(y) = \begin{cases} \sum_{r=0}^{s} \{C_r^+(N) T_{N+2r+1}(y) + C_r^-(N) T_{N-2r-1}(y)\}, & m-1 = 2s+1, \\ \sum_{r=0}^{s} \{D_r^+(N) T_{N+2r}(y) + D_r^-(N) T_{N-2r}(y)\}, & m-1 = 2s, \end{cases} \qquad (14)$$

$C_r^+, C_r^-, D_r^+, D_r^-$ – постоянные, зависящие только от N и возникающие при вычислении *(m-1)*-й первообразной полинома Чебышева первого рода порядка $N = n - m + 1$.

Для определенности рассмотрим случай четного $m : m - 1 = 2s + 1$. Учитывая, что на ∂K $(\tilde{a}^j \cdot x) = -\cos(\tau + \varphi_j)$, $< x, a^j >= \sin(\tau + \varphi_j)$, $T_n(\cos(\tau + \varphi_j)) = \cos n(\tau + \varphi_j)$, $j = 2,3,...,2m$, подставляя (13) (с учетом (14)) в первое граничное условие из (2), получим линейную систему $2m$ однородных уравнений относительно постоянных C_j, $j = 1,2,...,2m$:

$$\begin{cases} \sum_{j=2}^{2m} C_j \cos n\varphi_j + C_1 = 0, \\ \sum_{j=2}^{2m} C_j \sin n\varphi_j + iC_1 = 0, \\ \sum_{j=2}^{2m} C_j \cos(n - 2(i-1))\varphi_j = 0, \quad i = 2,...,m, \\ \sum_{j=2}^{2m} C_j \sin(n - 2(i-1))\varphi_j = 0, \quad i = 2,...,m. \end{cases} \qquad (15)$$

Как нетрудно заметить, определитель системы (15) совпадает с определителем условия (6), а, значит, равен нулю для некоторого $n \in N$, $n \geq 2m$. Следовательно, существует нетривиальное решение $\{C_j^*\}_{j=1}^{2m}$ системы (15). Этот набор будет определять нетривиальное решение (13) уравнения (1), удовлетворяющее первому граничному условию в (2). Используя следующие соотношения:

$$\int_0^x T_{n-1}(t)dt = \frac{1}{2n} T_n(x) - \frac{1}{2(n-2)} T_{n-2}(x), \; T'_{n-1}(x) = (n-1)U_{n-2}(x), \; U_n(\cos\theta) = \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin\theta},$$

где $U_n(x)$ – полиномы Чебышева второго рода n – порядка [11, с. 184-188], покажем, что функция (13) удовлетворяет остальным граничным условиям в (2), если набор $\{C_j^*\}_{j=1}^{2m}$ – решение системы (15).

Действительно, для каждого $p = 0,1,...,m-1$, $u_\nu^{(p)}|_{\partial K}$ имеет вид:

$$u_\nu^{(p)}|_{\partial K} = \sum_{j=2}^{2m} C_j \cos^p(\tau+\varphi_j) F_{m-1}^{(p)}(\cos(\tau+\varphi_j)) + C_1\{\cos n\tau + i\sin n\tau\} =$$

$$= \sum_{j=2}^{2m} C_j \cos^p(\tau+\varphi_j) F_{m-1-p}(\cos(\tau+\varphi_j)) + C_1\{\cos n\tau + i\sin n\tau\}. \qquad (16)$$

Будем для определенности считать p четным: $p = 2q$, тогда $m-p-1 = 2s+1-2q = 2(s-q)+1$ – нечетное, $m-p-2 = 2s-2q = 2(s-q)$ – четное. Следовательно, используя формулу (14), а также

$$\cos^p(\tau+\varphi_j) = \sum_{i=0}^{q} \alpha_{2i}^{(2q)} \cos 2i(\tau+\varphi_j), \qquad (17)$$

где $\alpha_1^{(1)} = 1$, $\alpha_0^{(2)} = \alpha_2^{(2)} = 1/2$, $\alpha_0^{(2q)} = 1/2\alpha_1^{(2q-1)}$, $\alpha_{2q}^{(2q)} = 1/2\alpha_{2q-1}^{(2q-1)}$, $\alpha_{2i}^{(2q)} =$

$1/2\alpha_{2i-1}^{(2q-1)} + 1/2\alpha_{2i+1}^{(2q-1)}$, $i = 1,2,...,q-1$, из (16) получим:

$$u_\nu^{(p)}|_{\partial K} = \sum_{j=2}^{2m} C_j \sum_{i=0}^{q} \alpha_{2i}^{(2q)} \cos 2i(\tau+\varphi_j) \sum_{r=0}^{s-q} \{C_r^+(N)\cos(N+2r+1)(\tau+\varphi_j) +$$

$$C_r^-(N)\cos(N-2r-1)(\tau+\varphi_j)\} + C_2\{\cos n\tau + i\sin n\tau\} =$$

$$\sum_{k=1}^{m} P_k \cos(n-2(k-1))\tau \left\{ \sum_{j=2}^{2m} C_j \cos(n-2(k-1))\varphi_j + C_1 \right\} +$$

$$\sum_{k=1}^{m} Q_k \sin(n-2(k-1))\tau \left\{ \sum_{j=2}^{2m} C_j \sin(n-2(k-1))\varphi_j + iC_1 \right\} = 0.$$

Здесь коэффициенты P_k, Q_k определяются $N, p, \alpha_{2i}^{(2q)}, C_r^+, C_r^-, D_r^+, D_r^-$.

Последнее равенство выполнено для всех τ тогда и только тогда, когда выражения в фигурных скобках равны нулю, т.е. коэффициенты $C_1, C_2, ..., C_{2m}$ удовлетворяют системе (15). Достаточность условия (6) доказана.

2). *Необходимость*. Если $\lambda_1 = i$, $\lambda_2 = -i$, то, объединяя результаты первого пункта для случаев $\lambda_1 = i$, а затем для $\lambda_1 = -i$ с последующей заменой индекса 1 на 2, легко доказать необходимость условия (7) в виде:

$$\det \begin{pmatrix} 1 & i & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & -i & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \cos n\varphi_3 & \sin n\varphi_3 & \cos(n-2)\varphi_3 & \sin(n-2)\varphi_3 & \cdots & \cos(n-2(m-1))\varphi_3 & \sin(n-2(m-1))\varphi_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \cos n\varphi_{2m} & \sin n\varphi_{2m} & \cos(n-2)\varphi_{2m} & \sin(n-2)\varphi_{2m} & \cdots & \cos(n-2(m-1))\varphi_{2m} & \sin(n-2(m-1))\varphi_{2m} \end{pmatrix} = 0,$$

из которого (7) получается путем разложения по первым двум столбцам.

Достаточность условия (7) доказывается так же, как и достаточность в предыдущем пункте. Здесь, очевидно, решение задачи

$$\Delta \cdot < \nabla, a^3 >< \nabla, a^4 > \cdots < \nabla, a^{2m-1} >< \nabla, a^{2m} > u = 0, \qquad (18)$$

$$u|_{\partial K} = 0,\ u'_\nu|_{\partial K} = 0,\ \ldots,\ u_\nu^{(m-1)}|_{\partial K} = 0, \qquad (2)$$

следует искать в виде:

$$u(x) = \frac{C_1}{2n}(x_1 + ix_2)^n + \frac{C_2}{2n}(x_1 - ix_2)^n + \sum_{j=3}^{2m} C_j F_{m-1}(-\tilde{a}^j \cdot x) \qquad (19)$$

Как и при доказательстве первого пункта, существование ненулевого набора коэффициентов $C_1, C_2, ..., C_{2m}$, а, следовательно, ненулевого решения задачи (18), (2) вида (19) следует из выполнения условия (7).

РЕЗЮМЕ

В роботі одержано критерій нетривіальної розв'язності однорідної задачі Діріхле в одиничному крузі K для загального рівняння парного порядку $2m$, $m > 2$, зі сталими комплексними коефіцієнтами і однорідним виродженим символом. Встановлено залежність між значенням коренів характеристичного рівняння і існуванням нетривіального розв'язку задачі з простору $C^{2m}(\overline{K})$ для випадку коренів характеристичного рівняння, рівних $\pm i$.

SUMMARY

It is obtained a criterion of nontrivial solvability of homogeneous Dirichlet problem in a unit disk K for general equation of even order $2m$, $m > 2$, with the constant complex coefficient and homogeneous degenerated symbol. Dependence between value of characteristics roots and existence of nontrivial solution from the space $C^{2m}(\overline{K})$ in the case when characteristics roots equal $\pm i$ is established.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бурский В.П., Буряченко Е.А. Некоторые вопросы нетривиальной разрешимости однородной задачи Дирихле для линейных уравнений произвольного чётного порядка в круге // Матем. заметки. – 2005. – Т.74. – №.4. – С.1032-1043.
2. Хермандер Л. Анализ линейных дифференциальных операторов: в 4-х т. – М.: Мир, 1986. – Т.2. – 456 с.
3. Бицадзе А.В. О единственности решения задачи Дирихле для эллиптических уравнений с частными производными // Успехи матем. наук. – 1948. – Т.3. – Вып. 6. – С.211-212.
4. Бурский В.П. О нарушении единственности решения задачи Дирихле для эллиптических систем второго порядка в круге // Матем. заметки. – 1990. – Т.48. – №3. – С.32-36.
5. Буряченко Е.А. О единственности решений задачи Дирихле в круге для дифференциальных уравнений четвертого порядка в вырожденных случаях // Нелинейные граничные задачи. – 2000. – Т. 10. – С.44-49.
6. Товмасян Н.Э.Общая краевая задача для эллиптических систем второго порядка с постоянными коэффициентами // Дифференциальные уравнения. – 1966. – Т. 2. – №1. – С.3-23.
7. Babayan A.O. On unique solvability of Dirichlet problem for fourth order properly elliptic equation // Izvestia Natsionalnoi Akademii Nauk Armenii. – 1999. – Vol.34. – №5. – P. 5-18.
8. Бурский В.П. Методы исследования граничных задач для общих дифференциальных уравнений. – К.: Наукова думка, 2002. – 316 с.
9. Векуа И.Н. Новые методы решения эллиптических уравнений. – М.-Л.: Гостехтеориздат, 1948. – 296 с.
10. Бицадзе А.В. Некоторые классы дифференциальных уравнений в частных производных. – М.: Наука, 1981. – 448 с.
11. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены. – М.: Наука, 1974. – 295 с.

Надійшла до редакції 04.09.2007 р.

УДК 517.977, 531.39

ОТНОСИТЕЛЬНАЯ КОМПАКТНОСТЬ ТРАЕКТОРИЙ УРАВНЕНИЯ ЭЙЛЕРА-БЕРНУЛЛИ С УПРАВЛЕНИЕМ В ВИДЕ ОБРАТНОЙ СВЯЗИ

А.Л.Зуев,
Институт прикладной математики и механики НАН Украины

Статья посвящена исследованию дифференциального уравнения в гильбертовом пространстве, которое описывает колебания упругой балки Эйлера-Бернулли с управлением в виде обратной связи. Доказана относительная компактность положительных полутраекторий рассмотренного уравнения. Получено описание предельных множеств с помощью построения функционала Ляпунова в явном виде и принципа инвариантности.

Введение. Исследованию систем дифференциальных уравнений в бесконечномерных пространствах с использованием управления в виде обратной связи посвящен ряд работ отечественных и зарубежных авторов [1-6]. Одним из наиболее эффективных подходов в этой области является прямой метод Ляпунова, который позволяет исследовать асимптотические свойства решений (сильная устойчивость, частичная устойчивость и стабилизируемость) для линейных и нелинейных систем [5, 7]. В работах [5, 8] построены функционалы Ляпунова в явном виде для нелинейных систем дифференциальных уравнений, описывающих управляемые колебания балки Эйлера-Бернулли. В цитируемых работах также найдены функционалы управления с обратной связью, которые решают задачи сильной стабилизации и частичной стабилизации положения равновесия.

Следует отметить, что в известных публикациях по управлению бесконечномерными моделями Эйлера-Бернулли рассматриваются только балки со свободным концом или точечной массой на конце (соответствующие ссылки приведены в [5, 8, 9]). Уравнения движения более сложной механической системы, состоящей из нескольких упругих балок и твердых тел, были получены в работе автора [10]. Для частного случая этой системы в статье [11] исследованы линеаризованные уравнения движения в окрестности положения равновесия, с учетом действия силы тяжести и движения твердого тела, прикрепленного к концу балки. Там же установлена корректность абстрактной задачи Коши для соответствующего уравнения Эйлера-Бернулли и доказана неасимптотическая устойчивость тривиального решения системы с управлением в виде обратной связи. Поскольку в цитируемой работе производная функционала Ляпунова не является определенно-отрицательной, то вопрос о существовании предельных точек решений при $t \to +\infty$ требует отдельного рассмотрения. Исследованию этого вопроса посвящена данная статья.

Постановка задачи и вспомогательные результаты. Рассмотрим линейное пространство

$$X = \{(\eta,\zeta,\phi,\omega,p,q)^T : \eta \in H^2(0,l), \zeta \in L_2(0,l), \eta(0) = \eta'(0) = 0, \phi,\omega,p,q \in R\},$$

где $H^k(0,l)$ – пространство Соболева функций из $L_2(0,l)$, имеющих все обобщенные производные до порядка k включительно из $L_2(0,l)$. Для элементов

$$\xi_1 = (\eta_1,\zeta_1,\phi_1,\omega_1,p_1,q_1)^T \in X, \quad \xi_2 = (\eta_2,\zeta_2,\phi_2,\omega_2,p_2,q_2)^T \in X,$$

определим скалярное произведение формулой

$$< \xi_1,\xi_2 >_X = \int_0^l (\eta_1''(x)\eta_2''(x) + \zeta_1(x)\zeta_2(x))dx + \phi_1\phi_2 + \omega_1\omega_2 + p_1p_2 + q_1q_2.$$

Используя неравенство Коши-Буняковского, легко проверить, что для всякой функции $\eta \in H^1(0,l)$ в случае $\eta(0) = 0$ справедливо неравенство Фридрихса следующего вида:

$$\|\eta\|^2_{L_2(0,l)} = \int_0^l \eta^2(x)dx = \int_0^l \left(\int_0^x \eta'(s)ds \right)^2 dx \le \int_0^l \left(\int_0^x ds \cdot \int_0^x \eta'^2(s)ds \right) dx =$$

$$= \int_0^l \left(\eta'^2(s) \int_s^l xdx \right) ds \le \frac{l^2}{2} \int_0^l \eta'^2(s)ds = \frac{l^2}{2} \|\eta'\|^2_{L_2(0,l)} \qquad (1)$$

Аналогично, при $\eta \in H^2(0,l)$, $\eta'(0) = 0$ получаем:

$$\|\eta'\|^2_{L_2(0,l)} \le \frac{l^2}{2} \|\eta''\|^2_{L_2(0,l)}. \qquad (2)$$

© Зуев А.Л.

Из (1)-(2) для любой функции $\eta \in H^2(0,l)$, $\eta(0) = \eta'(0) = 0$ следует оценка:

$$\|\eta\|_{H^2(0,l)} = \left(\|\eta\|^2_{L_2(0,l)} + \|\eta'\|^2_{L_2(0,l)} + \|\eta''\|^2_{L_2(0,l)}\right)^{1/2} \le \left(\frac{l^4}{4} + \frac{l^2}{2} + 1\right)^{1/2} \|\eta''\|_{L_2(0,l)}.$$

Отсюда легко видеть, что норма $\|\xi\|_X = \sqrt{<\xi,\xi>_X}$ эквивалентна стандартой норме в линейном подпространстве X гильбертова пространства $H^2(0,l)\times L_2(0,l)\times \mathrm{R}^4$, следовательно, $\left(X, \|\cdot\|_X\right)$ – гильбертово пространство.

Пусть задано линейное дифференциальное уравнение

$$\dot{\xi} = A\xi + Bu, \tag{3}$$

где $\xi = \xi(t) \in X$ – фазовый вектор, $u \in \mathrm{R}$ – управление, точка обозначает производную по времени t. Определим линейный неограниченный оператор $A: D(A) \to X$, элемент $B \in X$ и управление с обратной связью $u = h(\xi)$ следующим образом [11]:

$$A:\xi = \begin{pmatrix} \eta \\ \zeta \\ \phi \\ \omega \\ p \\ q \end{pmatrix} \mapsto A\xi = \begin{pmatrix} \zeta \\ -\frac{1}{\rho}(c\eta'')'' + \gamma\phi \\ \omega \\ 0 \\ \gamma\phi + \frac{1}{m}(c\eta'')'|_{x=l} \\ -\frac{c}{J}\eta''|_{x=l} \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi \\ 0 \\ 1 \\ \psi(l) \\ \psi'(l) \end{pmatrix}, \tag{4}$$

$$h(\xi) = -\frac{1}{\beta}\left\{k\omega + \left(\alpha - \gamma\left(\int_0^l \rho\psi\,dx + m\psi(l)\right)\right)\phi + \int_0^l c\eta''\psi''dx + (c\eta''\psi' - (c\eta'')'\psi)|_{x=0} - \right.$$

$$\left. - \gamma\left(\int_0^l \rho\eta\,dx + m\eta(l)\right)\right\}, \tag{5}$$

где

$$D(A) = \{\xi \in X : \eta \in H^4(0,l), \zeta \in H^2(0,l), \zeta(0) = \zeta'(0) = 0, p = \zeta(l), q = \zeta'(l)\}. \tag{6}$$

Будем предполагать, что γ – константа, α, β, c, ρ, m, J – положительные константы, $\psi(x)$ – функция класса $C^2[0,l]$. Пояснения относительно физического смысла компонент фазового вектора и коэффициентов системы (3) содержатся в работе [11].

Обозначим через

$$\widetilde{A}: \xi \mapsto A\xi + Bh(\xi)$$

линейный оператор, в котором A, B, $u = h(\xi)$ заданы формулами (4), (5). Легко видеть, что $D(\widetilde{A}) = D(A)$, поскольку $h(\xi)$ в формуле (5) определено при всех $\xi \in D(A)$. При достаточно больших α и β в работе [11] показано, что линейный неограниченный оператор $\widetilde{A}: D(\widetilde{A}) \to X$ является инфинитезимальным генератором сильно непрерывной полугруппы линейных операторов $\{e^{t\widetilde{A}}\}_{t\ge 0}$ в X, т.е. всякое обобщенное (mild) решение $\xi(t)$ абстрактной задачи Коши для уравнения (3) с $u = h(\xi)$ и начальными условиями

$$\xi(0) = \xi_0 \in X \tag{7}$$

записывается в виде:

$$\xi(t) = e^{t\widetilde{A}}\xi_0, \quad t \ge 0.$$

Там же доказано, что решение $\xi = 0$ системы (3) с управлением в виде обратной связи $u = h(\xi)$ сильно устойчиво по Ляпунову, т.е. для каждого $\varepsilon > 0$ существует такое $\delta = \delta(\varepsilon) > 0$, что любое решение задачи (3), (5), (7) обладает свойством:

$$\|\xi_0\|_X < \delta \Rightarrow \|\xi(t)\|_X < \varepsilon, \forall t \geq 0.$$

Доказательство устойчивости в работе [11] основано на использовании функционала Ляпунова следующего вида:

$$2V(\xi) = \alpha\phi^2 + \beta\omega^2 + \int_0^l \{(\zeta - \psi\omega)^2 \rho + \eta''^2 c\} dx + m\{p - \psi(l)\omega\}^2 + J\{q - \psi'(l)\omega\}^2 - \\ - 2\gamma\phi\left\{\int_0^l \eta\rho dx + m\eta(l)\right\}, \quad (8)$$

при этом показано, что полугруппа $\{e^{t\tilde{A}}\}_{t\geq 0}$ является сжимающей в пространстве X с нормой

$$\|\xi\|_V = \sqrt{V(\xi)},$$

и нормы $\|\xi\|_V$, $\|\xi\|_X$ эквивалентны в X, если α и β – достаточно большие константы (см. [11]).

Вычисляя производную функционала $V(\xi)$ в силу уравнения (3) с управлением $u = h(\xi)$, нетрудно проверить, что

$$\dot{V}(\xi) = -k\omega^2 \leq 0. \quad (9)$$

Неравенство (9) обеспечивает невозрастание функции $V(\xi(t))$ на решениях уравнения (3) с обратной связью $u = h(\xi)$. Поэтому возникает вопрос о возможности исследования ω-предельных множеств этого уравнения с помощью принципа инвариантности ЛаСалля [12] и соответствующей модификации теоремы Барбашина-Красовского. Как известно [7, 12-14], положительный ответ на этот вопрос требует доказательства предкомпактности полутраекторий в бесконечномерном пространстве X.

Доказательство предкомпактности траекторий. Основным результатом данной работы является следующее утверждение.

Теорема 1. *Пусть α и β – достаточно большие константы, $k > 0$. Тогда всякая положительная полутраектория $\{\xi(t)\}_{t\geq 0}$ уравнения* (3) *с управлением $u = h(\xi)$ в виде обратной связи* (5) *содержится в компактном подмножестве пространства X.*

Доказательство. Рассмотрим уравнение относительно $\xi \in D(A)$ с параметрами $\lambda > 0$, $u \in \mathrm{R}$, $\tilde{\xi} \in X$:

$$A\xi + Bu - \lambda\xi = \tilde{\xi}. \quad (10)$$

Запишем это уравнение по компонентам векторов $\xi = (\eta, \zeta, \phi, \omega, p, q)^T$ и $\tilde{\xi} = (\tilde{\eta}, \tilde{\zeta}, \tilde{\phi}, \tilde{\omega}, \tilde{p}, \tilde{q})^T$:

$$\zeta(x) - \lambda\eta(x) = \tilde{\eta}(x), -\frac{c}{\rho}\frac{d^4\eta(x)}{dx^4} + \gamma\phi - \lambda\zeta(x) + \psi(x)u = \tilde{\zeta}(x), \quad x \in (0,l), \quad (11)$$

$$\omega - \lambda\phi = \tilde{\phi}, -\lambda\omega + u = \tilde{\omega}, \quad (12)$$

$$\gamma\phi + \frac{c}{m}\eta'''(l) - \lambda p + \psi(l)u = \tilde{p}, -\frac{c}{J}\eta''(l) - \lambda q + \psi'(l)u = \tilde{q}. \quad (13)$$

Разрешая уравнения (12) относительно ϕ, ω, получим

$$\phi = \frac{u - \tilde{\omega}}{\lambda^2} - \frac{\tilde{\phi}}{\lambda}, \omega = \frac{u - \tilde{\omega}}{\lambda}. \quad (14)$$

Из первого уравнения (11) выразим

$$\zeta(x) = \tilde{\eta}(x) + \lambda\eta(x) \quad (15)$$

и подставим представления (14), (15) во второе уравнение (11). В результате получим дифференциальное уравнение относительно $\eta(x)$:

$$\frac{d^4\eta(x)}{dx^4} + \frac{\lambda^2\rho}{c}\eta(x) = f_0(x)u + f_1(x,\tilde{\xi}), \quad x \in (0,l), \quad (16)$$

где

$$f_0(x) = \frac{\rho}{c}\left(\frac{\gamma}{\lambda^2} + \psi(x)\right), f_1(x,\tilde{\xi}) = -\frac{\rho}{c}\left(\frac{\gamma}{\lambda}\tilde{\phi} + \frac{\gamma}{\lambda^2}\tilde{\omega} + \lambda\tilde{\eta}(x) + \tilde{\zeta}(x)\right).$$

Из свойства $\xi \in D(A)$ вытекают граничные условия

$$\eta(0) = \eta'(0) = 0, \tag{17}$$

а также $p = \zeta(l)$, $q = \zeta'(l)$. Два последних условия с учетом (15) могут быть записаны в виде

$$p = \tilde{\eta}(l) + \lambda\eta(l), q = \tilde{\eta}'(l) + \lambda\eta'(l). \tag{18}$$

Подстановка равенств (14), (18) в (13) дает следующие граничные условия на $\eta(x)$ при $x = l$:

$$\eta'''(l) - \frac{\lambda^2 m}{c}\eta(l) = g_{10}u + g_{11}(\tilde{\xi}), \tag{19}$$

$$\eta''(l) + \frac{\lambda^2 J}{c}\eta'(l) = g_{20}u + g_{21}(\tilde{\xi}), \tag{20}$$

где

$$g_{10} = -\frac{m}{c}\left(\frac{\gamma}{\lambda^2} + \psi(l)\right), g_{11}(\tilde{\xi}) = \frac{m}{c}\left(\frac{\gamma}{\lambda}\tilde{\phi} + \frac{\gamma}{\lambda^2}\tilde{\omega} + \lambda\tilde{\eta}(l) + \tilde{p}\right),$$

$$g_{20} = \frac{J\psi'(l)}{c}, g_{21}(\tilde{\xi}) = -\frac{J}{c}(\lambda\tilde{\eta}'(l) + \tilde{q}).$$

Таким образом, если $\eta \in H^4(0,l)$ – решение краевой задачи (16), (17), (19), (20) при заданных $\tilde{\xi} \in X$, λ, u, то формулы (14), (15), (18) определяют компоненты ϕ, ω, ζ, p, q решения $\xi \in D(A)$ уравнения (10). И наоборот, если $\xi \in D(A)$ – решение уравнения (10), то его компонента $\eta \in H^4(0,l)$ является решением краевой задачи (16), (17), (19), (20), а остальные компоненты ξ удовлетворяют соотношениям (14), (15), (18).

С помощью метода вариации постоянной найдем общее решение уравнения (16) при граничных условиях (17):

$$\eta(x) = \frac{1}{4\mu^3}\int_0^x \left(f_0(s)u + f_1(s,\tilde{\xi})\right)K(x-s)ds + C_1\eta_1(x) + C_2\eta_2(x). \tag{21}$$

Здесь введен вспомогательный параметр $\mu > 0$ и функции $K(x)$, $\eta_1(x)$, $\eta_2(x)$ по формулам

$$\mu = \left(\frac{\lambda^2\rho}{4c}\right)^{1/4}, \tag{22}$$

$$K(x) = \sin\mu x \operatorname{ch}\mu x - \cos\mu x \operatorname{ch}\mu x, \eta_1(x) = \sin\mu x \operatorname{ch}\mu x, \eta_2(x) = \cos\mu x \operatorname{ch}\mu x - e^{\mu x}\sin\mu x.$$

Поскольку $K(x)$ – гладкая функция, удовлетворяющая условиям

$$K(0) = K'(0) = K''(0) = K'''(0) = 0,$$

то j-я производная по x функции (21) может быть представлена следующим образом:

$$\eta^{(j)}(x) = \frac{1}{4\mu^3}\int_0^x \left(f_0(s)u + f_1(s,\tilde{\xi})\right)K^{(j)}(x-s)ds + C_1\eta_1^{(j)}(x) + C_2\eta_2^{(j)}(x), j = \overline{0,3}. \tag{23}$$

Для любых $\tilde{\xi} \in X$ и $\lambda > 0$ функции $f_0(\cdot)$ и $f_1(\cdot,\tilde{\xi})$ лежат в $L_2(0,l)$, поэтому из представлений (23) и уравнения (16) следует, что решение $\eta(x)$, определяемое формулой (21), лежит в $H^4(0,l)$ при любых значениях C_1, C_2, u.

Для исключения параметров C_1, C_2, u из решения $\eta(x)$ подставим выражения (23) в граничные условия (19), (20) и формулу для управления с обратной связью (5). В результате получим систему трех линейных алгебраических уравнений относительно C_1, C_2, u:

$$W\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1(\tilde{\xi}) \\ v_2(\tilde{\xi}) \\ v_3(\tilde{\xi}) \end{pmatrix}, \tag{24}$$

где компоненты матрицы $W = (w_{ij})$ и столбца свободных членов $v_i(\tilde{\xi})$ задаются следующими

соотношениями:

$$w_{11} = -2\mu^3(\sin\mu l\mu l - \cos\mu l\mu l) - \frac{4\mu^4 m}{\rho}\sin\mu l\mu l,$$

$$w_{12} = -2\mu^3\left(e^{\mu l}(\cos\mu l - \sin\mu l) + \cos\mu l\mu l + \sin\mu l\mu l\right) - \frac{4\mu^4 m}{\rho}\left(\cos\mu l\mu l - e^{\mu l}\sin\mu l\right),$$

$$w_{13} = \int_0^l f_0(s)\cos\mu(s-l)\mu(s-l)ds - g_{10} -$$

$$-\frac{\mu m}{\rho}\int_0^l f_0(s)(\cos\mu(s-l)\mu(s-l) - \sin\mu(s-l)\mu(s-l))ds,$$

$$w_{21} = 2\mu^2\cos\mu l\mu l + \frac{4\mu^5 J}{\rho}(\cos\mu l\mu l + \sin\mu l\mu l),$$

$$w_{22} = -2\mu^2\left(\sin\mu l\mu l + e^{\mu l}\cos\mu l\right) - \frac{4\mu^5 J}{\rho}\left(e^{\mu l}(\sin\mu l + \cos\mu l) + \sin\mu l\mu l - \cos\mu l\mu l\right),$$

$$w_{23} = -\frac{1}{2\mu}\int_0^l f_0(s)(\cos\mu(s-l)\mu(s-l) + \sin\mu(s-l)\mu(s-l))ds +$$

$$+\frac{2\mu^2 J}{\rho}\int_0^l f_0(s)\sin\mu(s-l)\mu(s-l)ds - g_{20},$$

$$w_{31} = 2\mu^2 c\left(\int_0^l \psi''(x)\cos\mu x\mu x dx + \psi'(0)\right) - \gamma m\sin\mu l\mu l +$$

$$+\frac{\gamma\rho}{4\mu}\left(e^{\mu l}(\cos\mu l - \sin\mu l) - e^{-\mu l}(\cos\mu l + \sin\mu l)\right),$$

$$w_{32} = 4\mu^3 c\psi(0) - 2\mu^2 c\left(\int_0^l\left(\sin\mu x\mu x + e^{\mu x}\cos\mu x\right)\psi''(x)dx + \psi'(0)\right) +$$

$$+\gamma m\left(e^{\mu l}\sin\mu l - \cos\mu l\mu l\right) - \frac{\gamma\rho}{4\mu}\left(e^{\mu l}(3\cos\mu l - \sin\mu l) + e^{-\mu l}(\cos\mu l - \sin\mu l) - 4\right),$$

$$w_{33} = \beta + \frac{c}{2\mu}\int_0^l\int_0^x f_0(s)(\cos\mu(x-s)\mu(x-s) + \sin\mu(x-s)\mu(x-s))\psi''(x)dsdx +$$

$$+\frac{k}{2\mu^2}\sqrt{\frac{\rho}{c}} + \frac{\gamma\rho}{4\mu^3}\int_0^l\int_0^x f_0(s)(\cos\mu(x-s)\mu(x-s) - \sin\mu(x-s)\mu(x-s))dsdx +$$

$$+\frac{\gamma m}{4\mu^3}\int_0^l f_0(s)(\sin\mu(s-l)\mu(s-l) - \cos\mu(s-l)\mu(s-l))ds + \frac{\alpha^*\rho}{\mu^4 c},$$

$$v_1(\tilde{\xi}) = -\int_0^l f_1(s,\tilde{\xi})\cos\mu(s-l)\mu(s-l)ds +$$

$$+\frac{\mu m}{\rho}\int_0^l f_1(s,\tilde{\xi})(\cos\mu(s-l)\mu(s-l) - \sin\mu(s-l)\mu(s-l))ds + g_{11}(\tilde{\xi}),$$

$$v_2(\tilde{\xi}) = \frac{1}{2\mu}\int_0^l f_1(s,\tilde{\xi})(\cos\mu(s-l)\mu(s-l) + \sin\mu(s-l)\mu(s-l))ds -$$

$$-\frac{2\mu^2 J}{\rho}\int_0^l f_1(s,\tilde{\xi})\sin\mu(s-l)\mu(s-l)ds + g_{21}(\tilde{\xi}),$$

$$v_3(\tilde{\xi}) = -\frac{c}{2\mu}\int_0^l\int_0^x f_1(s,\tilde{\xi})(\cos\mu(x-s)\mu(x-s) + \sin\mu(x-s)\mu(x-s))\psi''(x)dsdx +$$

$$+\frac{\gamma\rho}{4\mu^3}\int_0^l\int_0^x f_1(s,\tilde{\xi})(\sin\mu(x-s)\mu(x-s) - \cos\mu(x-s)\mu(x-s))dsdx +$$

$$+\frac{\gamma m}{4\mu^3}\int_0^l f_1(s,\tilde{\xi})(\cos\mu(s-l)\mu(s-l)-\sin\mu(s-l)\mu(s-l))ds+$$

$$+\frac{\alpha^*\tilde{\phi}+k\tilde{\omega}}{2\mu^2}\sqrt{\frac{\rho}{c}}+\frac{\alpha^*\rho\tilde{\omega}}{4\mu^4 c}, \tag{25}$$

$$\alpha^* = \alpha-\gamma\left(\rho\int_0^l\psi(x)dx+m\psi(l)\right)>0.$$

В приведенных формулах параметр λ выражен через μ посредством соотношения (22); величины $f_0(s)$, $f_1(s,\tilde{\xi})$, g_{10}, $g_{11}(\tilde{\xi})$, g_{20}, $g_{21}(\tilde{\xi})$ определены выше.

При заданных константах $c>0$, $m>0$, $J>0$, $\rho>0$, γ и функции $\psi\in C^2[0,l]$, компоненты матрицы W зависят только от параметра μ. Разложим определитель W по степеням μ

$$\det(W)=\frac{2\rho\alpha^*}{c}\mu+o(\mu) \tag{26}$$

при $\mu\to 0$. Выберем такое достаточно малое число $\mu>0$, чтобы выполнялось условие $\det(W)\neq 0$, исходя из представления (26). Далее будем считать, что число $\lambda>0$ фиксировано и соответствует выбранному μ по формуле (22), кроме того, параметр u связан с ξ посредством линейного функционала (5). Из условия $\det(W)\neq 0$ следует, что для всякого $\tilde{\xi}\in X$ существует единственный элемент $\xi\in D(A)$, который удовлетворяет уравнению (10) при условии (5). Это означает, что $\xi=(\tilde{A}-\lambda I)^{-1}\tilde{\xi}$, т.е. существует резольвента $(\tilde{A}-\lambda I)^{-1}: X\to X$ оператора $\tilde{A}$ при выбранном $\lambda>0$. Запишем резольвенту в покомпонентном виде:

$$(\tilde{A}-\lambda I)^{-1}\tilde{\xi}=(R_\eta(\tilde{\xi}),R_\zeta(\tilde{\xi}),R_\phi(\tilde{\xi}),R_\omega(\tilde{\xi}),R_p(\tilde{\xi}),R_q(\tilde{\xi}))^T, \tag{27}$$

где линейные операторы

$$R_\eta: X\to\{\eta\in H^2(0,l):\eta(0)=\eta'(0)=0\},$$

$$R_\zeta: X\to\{\zeta\in L_2(0,l)\}$$

и функционалы

$$R_\phi: X\to\{\phi\in R\}, R_\omega: X\to\{\omega\in R\}, R_p: X\to\{p\in R\}, R_q: X\to\{q\in R\}$$

задаются формулами (14), (15), (18), (21), (24).

При сделанных предположениях для любых $v_1(\tilde{\xi})$, $v_2(\tilde{\xi})$, $v_2(\tilde{\xi})$ справедлива оценка решения C_1, C_2, u системы (24):

$$|C_1|+|C_2|+|u|\le M_1(|v_1(\tilde{\xi})|+|v_2(\tilde{\xi})|+|v_3(\tilde{\xi})|), \tag{28}$$

где положительная константа M_1 определяется нормой матрицы W^{-1}. Из формул (25) на основании неравенств Коши-Буняковского и Фридрихса (1)-(2) следует, что $v_j: X\to R$ – линейные ограниченные функционалы ($j=1,2,3$). Поэтому оценка (28) обеспечивает ограниченность линейного отображения $\tilde{\xi}\mapsto(C_1,C_2,u)$, определенного системой (24):

$$|C_1|+|C_2|+|u|\le M_2\left\|\tilde{\xi}\right\|_X,\quad \forall\tilde{\xi}\in X, \tag{29}$$

с некоторой константой $M_2\ge 0$. Следовательно, функционалы $R_\phi:\tilde{\xi}\mapsto\phi$, $R_\omega:\tilde{\xi}\mapsto\omega$, определенные в (14), являются линейными ограниченными функционалами из X в R. Путем применения неравенства Коши-Буняковского в (23) получим оценку:

$$\left\|\eta^{(j)}\right\|_{L_2(0,l)}\le\frac{1}{4\mu^3}\left(\int_0^l\left(\int_0^x\left(f_0(s)u+f_1(s,\tilde{\xi})\right)K^{(j)}(x-s)ds\right)^2dx\right)^{1/2}+|C_1|\cdot\left\|\eta_1^{(j)}\right\|_{L_2(0,l)}+$$

$$+|C_2|\cdot\left\|\eta_2^{(j)}\right\|_{L_2(0,l)} \le \frac{\sqrt{l}}{4\mu^3}\left\|f_0(\cdot)u+f_1(\cdot,\tilde{\xi})\right\|_{L_2}+|C_1|\cdot\left\|\eta_1^{(j)}\right\|_{L_2(0,l)}+|C_2|\cdot\left\|\eta_2^{(j)}\right\|_{L_2(0,l)}.$$

Отсюда с помощью оценки (29) следует существование константы $M_3 \ge 0$:

$$\|\eta\|_{H^3(0,l)} = \left(\sum_{j=0}^{3}\left\|\eta^{(j)}\right\|^2_{L_2(0,l)}\right)^{1/2} \le M_3\left\|\tilde{\xi}\right\|_X. \qquad (30)$$

По теореме вложения (см. напр. [15, с. 83]) пространство $H^3(0,l)$ компактно вложено в $H^2(0,l)$, т.е. линейный оператор $R_\eta : \tilde{\xi} \mapsto \eta$, определенный с помощью (21), (24) переводит ограниченные подмножества X в предкомпактные подмножества $H^2(0,l)$ вследствие оценки (30).

Формулы (15) и (30) обеспечивают выполнение оценки

$$\|\zeta\|_{H^2(0,l)} \le \|\tilde{\eta}\|_{H^2(0,l)} + \lambda\|\eta\|_{H^2(0,l)} \le \|\tilde{\eta}\|_{H^2(0,l)} + \lambda M_3\left\|\tilde{\xi}\right\|_X \le M_4\left\|\tilde{\xi}\right\|_X$$

с некоторой положительной константой M_4. Следовательно, линейный оператор $R_\zeta : \tilde{\xi} \mapsto \zeta$, действующий из X в $L_2(0,l)$ по формулам (15), (21), (24), является компактным. Оценим теперь компоненты p и q вектора ξ в представлении (18), учитывая граничные условия $\eta(0) = \eta'(0) = \tilde{\eta}(0) = \tilde{\eta}'(0) = 0$:

$$|p| \le |\tilde{\eta}(l)| + \lambda|\eta(l)| = \left|\int_0^l \tilde{\eta}'(x)dx\right| + \lambda\left|\int_0^l \eta'(x)dx\right| \le \|1\|_{L_2(0,l)}\cdot\left(\|\tilde{\eta}'\|_{L_2(0,l)} + \lambda\|\eta'\|_{L_2(0,l)}\right),$$

$$|q| \le |\tilde{\eta}'(l)| + \lambda|\eta'(l)| \le \|1\|_{L_2(0,l)}\cdot\left(\|\tilde{\eta}''\|_{L_2(0,l)} + \lambda\|\eta''\|_{L_2(0,l)}\right).$$

Правая часть каждого их этих неравенств не превосходит $M_5\left\|\tilde{\xi}\right\|_X$ при некоторой константе $M_5 > 0$ вследствие оценки (30) и неравенства Фридрихса вида (1)-(2). Приведенные оценки доказывают ограниченность линейных функционалов R_p и R_q. Итак, показано, что в обозначениях (27): R_η, R_ζ – компактные операторы, R_ϕ, R_ω, R_p, R_q – ограниченные функционалы, следовательно, оператор $(\tilde{A}-\lambda I)^{-1} : X \to X$ компактен.

При введении в пространстве X эквивалентной нормы $\|\cdot\|_V$ выполнены следующие свойства (см. [11]): полугруппа $\{e^{t\tilde{A}}\}_{t\ge 0}$ является сжимающей; оператор $\tilde{A}$ – m-диссипативен ($-A$ – аккретивен). Кроме того, поскольку $\overline{D(\tilde{A})} = X$, $\tilde{A}(0) = 0$ и $(\tilde{A}-\lambda I)^{-1}$ – компактный оператор при выбранном $\lambda > 0$, то каждая полутраектория $\{\xi(t)\}_{t\ge 0} = \{e^{t\tilde{A}}\xi(0)\}_{t\ge 0}$ уравнения (3), (5) предкомпактна по теореме 3 из [16]. Теорема доказана.

Для положительной полутраектории $\{\xi(t)\}_{t\ge 0} = \{e^{t\tilde{A}}\xi_0\}_{t\ge 0}$ обозначим через $\Omega(\xi_0)$ ее ω-предельное множество. Как отмечено выше, значения $V(\xi(t)) \ge 0$ не возрастают при $t \ge 0$, и $\dot{V}(\xi) = 0$ только при $\omega = 0$. Поэтому из доказанной теоремы и принципа инвариантности [12], [13, лемма 2] вытекает

Следствие. *Пусть α и β – достаточно большие константы, $k > 0$. Тогда для всякой полутраектории $\{\xi(t)\}_{t\ge 0}$ уравнения* (3) *с управлением $u = h(\xi)$ вида* (5). *множество $\Omega(\xi_0)$ является компактным инвариантнным относительно полугруппы $\{e^{t\tilde{A}}\}_{t\ge 0}$ подмножеством множества*

$$S_c = \{\xi \in X : \omega = 0, V(\xi) = c\},$$

при некоторой константе $c \ge 0$. Здесь функционал V определен формулой (8).

Выводы. Доказанный результат сводит анализ предельных множеств траекторий уравнения (3) с управлением в виде обратной связи (5) к исследованию инвариантных подмножеств S_c. В частности,

представляет дальнейший интерес проверка условий типа Барбашина-Красовского [13, теорема 2] с целью получения достаточных условий сильной асимптотической устойчивости или частичной устойчивости решения $\xi = 0$.

РЕЗЮМЕ

Статтю присвячено дослідженню диференціального рівняння у гільбертовому просторі, що описує коливання пружної балки Ейлера-Бернуллі з керуванням у вигляді зворотного зв'язку. Доведено відносну компактність позитивних напівтраєкторій розглянутого рівняння. Отримано зображення граничних множин за допомогою побудови функціоналу Ляпунова у явному вигляді та принципу інваріантності.

SUMMARY

The paper is devoted to the study of the differential equation in a Hilbert space that describes oscillations of an Euler-Bernoulli flexible beam subject to a feedback control. Relative compactness of the positive trajectories is proved for the equation considered. A representation of the limit set is proposed with the help of an explicit construction of a Lyapunov functional and the invariance principle.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Згуровский М.З., Мельник В.С. Нелинейный анализ и управление бесконечномерными системами. – Киев: Наук. думка, 1999. – 631 с.
2. Коробов В.И., Скляр Г.М. К вопросу о сильной стабилизируемости сжимающих систем в гильбертовых пространствах // Диф. уравнения. – 1984. – **20**, 11. – С. 1862-1869.
3. Barbu V. Analysis and control of nonlinear infinite dimensional systems. – San Diego, CA: Academic Press, 1992. – 476 p.
4. Curtain R.F., Zwart H. An introduction to infinite-dimensional linear systems theory. – New York: Springer-Verlag, 1995. – 698 p.
5. Luo Z.-H., Guo B.-Z., Morgul O. Stability and stabilization of infinite dimensional systems with applications. – London: Springer-Verlag, 1999. – 403 p.
6. Oostveen J. Strongly Stabilizable Distributed Parameter Systems. – Philadelphia: SIAM, 2000. – 150 p.
7. Шестаков А.А.Обобщенный прямой метод Ляпунова для систем с распределенными параметрами. – М.: Наука, 1990. – 320 с.
8. Zuyev A.L. Partial asymptotic stabilization of nonlinear distributed parameter systems // Automatica. – 2005. – **41**, 1. – P. 1-10.
9. Lagnese J.E., Leugering G. Controllability of Thin Elastic Beams and Plates // In: The control handbook (ed.: Levine W.S.). – Boca Raton: CRC Press – IEEE Press, 1996. – P. 1139-1156.
10. Зуев А.Л. Моделирование пространственного упругого манипулятора с телескопическим движением звеньев // Труды ИПММ НАН Украины. – 2005. – **10**. – С. 51-58.
11. Zuyev A.L. Stabilization of the spatial oscillations of an elastic system model // Вісник Київського університету імені Тараса Шевченка. Серія: фізико-математичні науки. – 2007. – 3. – С. 33-38. (arXiv:0707.2209v1)
12. LaSalle J.P. Stability theory and invariance principles // Dynamical systems. Vol. 1. Int. symp. on dyn. syst. Providence 1974 (L. Cesari, J.K. Hale, and J.P. LaSalle Eds.). – 1976. – New York: Academic Press. – P. 211-222.
13. Зуев А.Л. Частичная асимптотическая устойчивость абстрактных дифференциальных уравнений // Український математичний журнал. – 2006. – Т. 58. – 5. – С. 629-637.
14. Зуев А.Л. Об относительной компактности траекторий дифференциальных уравнений в банаховом пространстве // Доповіді НАН України. – 2007. – 2. – С. 7-12.
15. Функциональный анализ, изд. 2 / Под ред. С.Г. Крейна. – Москва: Наука, 1972. – 544 с.
16. Dafermos C.M., Slemrod M. Asymptotic Behavior of Nonlinear Contraction Semigroups // J. Funct. Anal. – 1973. – **13**. – P. 97-106.

Надійшла до редакції 30.11.2007 р.

УДК 517.983.36

ПРИМЕНЕНИЕ МУЛЬТИПЛИКАТОРОВ В $C(\mathbf{R}^n)$ К ПОЛУЧЕНИЮ АПРИОРНЫХ ОЦЕНОК ДЛЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ ОПЕРАТОРОВ С КВАЗИОДНОРОДНОЙ ГЛАВНОЙ ЧАСТЬЮ

Д.В.Лиманский

1. Введение. Пусть $l=(l_1,l_2,\ldots,l_n)$ — вектор с натуральными компонентами. Не нарушая общности, можно считать, что $l_1 \geq l_2 \geq \ldots \geq l_n$. Рассмотрим дифференциальный полином $P(D)$ вида

$$P(D)=\sum_{|\alpha:l|\leq 1} a_\alpha D^\alpha, \qquad a_\alpha \in \mathbf{C}. \tag{1}$$

Здесь $\alpha=(\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_n)\in \mathbf{Z}_+^n$, $\alpha_j \in \mathbf{Z}_+ := \{0,1,2,\ldots\}$; $|\alpha : l| := \alpha_1/l_1+\alpha_2/l_2+\ldots+\alpha_n/l_n$; $D=(D_1,D_2,\ldots,D_n)$, $D_j=-i\dfrac{\partial}{\partial x^j}$, $D^\alpha = D_1^{\alpha_1}D_2^{\alpha_2}\ldots D_n^{\alpha_n}$. Оператору (1) соответствует символ — полином $P(\xi)=\sum_{|\alpha:l|\leq 1} a_\alpha \xi^\alpha$, где $\xi=(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_n)\in \mathbf{R}^n$, $\xi^\alpha=\xi_1^{\alpha_1}\xi_2^{\alpha_2}\ldots\xi_n^{\alpha_n}$. Пусть, далее, $P^l(D)=\sum_{|\alpha:l|=1} a_\alpha D^\alpha$ — l-главная часть оператора $P(D)$, а $P^l(\xi)=\sum_{|\alpha:l|=1} a_\alpha \xi^\alpha$ — его главный l-квазиоднородный символ.

Напомним [1,2], что оператор вида (1) называется l-квазиэллиптическим, если $P^l(\xi)\neq 0$ при $\xi \in \mathbf{R}^n \setminus \{0\}$. В частности, в однородном случае, т.е. при $l_1=l_2=\ldots=l_n=l$, оператор $P(D)$ называют *эллиптическим порядка* l.

Хорошо известна тесная связь между квазиэллиптичностью оператора и существованием для него априорных оценок в анизотропных пространствах Соболева. Так, согласно [1], l-квазиэллиптичность оператора (1) эквивалентна при $1<p<\infty$ наличию априорной оценки

$$\|f\|_{W_p^l(\mathbf{R}^n)} := \sum_{|\alpha:l|\leq 1} \|D^\alpha f\|_{L^p(\mathbf{R}^n)} \leq C_1\|P(D)f\|_{L^p(\mathbf{R}^n)} + C_2\|f\|_{L^p(\mathbf{R}^n)} \tag{2}$$

с константами $C_1, C_2 > 0$, не зависящими от выбора $f \in C_0^\infty(\mathbf{R}^n)$.

В случае $p=\infty$ указанный выше критерий l-квазиэллиптичности оператора неверен. Например, в работе М.М.Маламуда [3] показано, что *наличие оценки* (2) *при* $p=\infty$ *возможно лишь в исключительных случаях.*

Де Лю и Миркил [4] следующим образом охарактеризовали эллиптический оператор с помощью оценок в пространстве $C(\mathbf{R}^n)$.

Теорема 1 [4]. *При* $n\geq 3$ *эллиптичность дифференциального полинома* $P(D)$ *порядка* $l\geq 2$ эквивалентна наличию априорной оценки

$$\|f\|_{W_\infty^{l-1}(\mathbf{R}^n)} := \sum_{|\alpha|\leq l-1} \|D^\alpha f\|_{C(\mathbf{R}^n)} \leq C_1\|P(D)f\|_{C(\mathbf{R}^n)} + C_2\|f\|_{C(\mathbf{R}^n)} \tag{3}$$

с константами $C_1, C_2 > 0$, не зависящими от выбора $f \in C_0^\infty(\mathbf{R}^n)$. Здесь $|\alpha|=\alpha_1+\alpha_2+\ldots+\alpha_n$. ■

Как показал Б.Мальгранж, условие $n\geq 3$ в теореме 1 существенно: для неэллиптического оператора второго порядка $P(D)=(D_1+i)(D_2+i)$ справедливы оценки (3) с $D^\alpha = D_j$, $j=1,2$ (см. [4]).

Вопрос об аналоге критерия де Лю и Миркила для l-квазиэллиптических операторов обсуждался в [5], где была доказана следующая

Теорема 2 [5] (см. также [6,7]). Пусть $n\geq 3$, и для оператора $P(D)$ вида (1) выполнено одно из следующих двух условий:

(i) $l_{n-2}=l_{n-1}=l_n$;

(ii) l_n не делится на l_j для некоторого $j\in\{1,\ldots,n-1\}$.

© Лиманский Д.В.

Тогда оператор $P(D)$ является l-квазиэллиптическим в точности тогда, когда справедлива априорная оценка

$$\sum_{|\alpha:l|<1} \|D^\alpha f\|_{C(\mathbf{R}^n)} \le C_1 \|P(D)f\|_{C(\mathbf{R}^n)} + C_2 \|f\|_{C(\mathbf{R}^n)} \tag{4}$$

с константами $C_1, C_2 > 0$, не зависящими от выбора $f \in C_0^\infty(\mathbf{R}^n)$. ■

Теорема 2 не является полным аналогом теоремы 1 де Лю и Миркила из-за теоретико-числовых ограничений на компоненты вектора l. Вопрос о точности указанных ограничений оставался открытым. Другими словами, если вектор $l = (l_1, l_2, \ldots, l_n)$ таков, что все его компоненты l_j, $j \in \{1, \ldots, n-1\}$, делятся на наименьшую l_n, было неизвестно, существуют ли операторы вида (1), удовлетворяющие оценке (4), но не являющиеся l-квазиэллиптическими? В настоящей работе построен явный пример такого оператора для конкретного вектора l указанного типа, у которого компонента l_n четна (теорема 5).Для доказательства этого результата используется новая теорема о мультипликаторах (теорема 4).

2. Мультипликаторы в $L^\infty(\mathbf{R}^n)$. Напомним [8], что измеримая (по Лебегу) ограниченная функция $\Phi : \mathbf{R}^n \to \mathbf{C}$ называется мультипликатором в $L^p(\mathbf{R}^n)$, $p \in [1, \infty]$, если оператор свертки $f \to T_\Phi f := F^{-1}\Phi F f$ отображает $L^p(\mathbf{R}^n) \cap L^2(\mathbf{R}^n)$ в $L^p(\mathbf{R}^n)$ и ограничен в $L^p(\mathbf{R}^n)$. Здесь Ff — преобразование Фурье функции f. Совокупность всех мультипликаторов в $L^p(\mathbf{R}^n)$ будем обозначать через M_p.

Простое описание пространств M_p известно лишь при $p = 1, 2, \infty$. Так, алгебра $M_1 = M_\infty$ — это множество образов конечных борелевских мер в $\mathbf{R}^n$ относительно преобразования Фурье — Стилтьеса. Для остальных значений $p \in (1, \infty)$ известны лишь достаточные условия включения $\Phi \in M_p$ (см. [1,8]). Отметим также, что $M_1 \subset M_p$ при $p \in (1, \infty)$.

Э.С.Белинским, М.З.Двейриным и М.М.Маламудом в [9] получена следующая теорема, дающая достаточные условия для проверки включения $\Phi \in M_1$.

Теорема 3 [9]. Пусть функция $\Phi \in C(\mathbf{R}^n)$ и при некоторых постоянных $\delta \in (0,1)$ и $A_\delta > 0$ удовлетворяет следующим условиям:

(i) для всех $\xi \in \mathbf{R}^n$ выполнено неравенство

$$\prod_{j=1}^n \left(1 + |\xi_j|\right)^\delta |\Phi(\xi)| \le A_\delta ; \tag{5}$$

(ii) для любого мультииндекса $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n) \in \mathbf{Z}_+^n$, такого, что $\alpha_j \in \{0,1\}$ для всех $j \in \{1, \ldots, n\}$, существует производная $D^\alpha \Phi$, и для всех $\xi \in \mathbf{R}^n$ выполнено неравенство

$$\prod_{j:\alpha_j=1} |\xi_j|^{1-\delta} \left(1 + |\xi_j|^{2\delta}\right) \prod_{j:\alpha_j=0} \left(1 + |\xi_j|\right)^\delta |D^\alpha \Phi(\xi)| \le A_\delta . \tag{6}$$

Тогда $\Phi \in M_1$. ■

Обозначим через $\overline{M_1}$ класс мультипликаторов, удовлетворяющих условиям теоремы 3. Также введем, следуя [10], отношение частичного порядка на множестве мультииндексов $\mathbf{Z}_+^n$: будем говорить, что $\alpha \le \beta$ для элементов $\alpha, \beta \in \mathbf{Z}_+^n$, если $\alpha_j \le \beta_j$ для всех $j \in \{1, \ldots, n\}$; при этом $\alpha < \beta$, если $\alpha_j < \beta_j$ хотя бы для одного j.

В применении к оценкам дифференциальных операторов функции Φ являются, как правило, рациональными функциями от ξ. В этих случаях проверка условий теоремы 3 значительно упрощается. Справедлива

Теорема 4. Пусть $\alpha=(\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_n)\in\mathbf{Z}_+^n$ — фиксированный ненулевой мультииндекс, $P(\xi)=P(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_n)$ — полином с комплексными коэффициентами, отличный от нуля при $|\xi|:=\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2+\ldots+\xi_n^2}>R$ для некоторого $R>0$. Рассмотрим семейство функций вида

$$\Phi_\beta(\xi)=\chi(\xi)\frac{\xi^\beta}{P(\xi)},\quad 0<\beta\le\alpha, \tag{7}$$

где $\chi\in C_0^\infty(\mathbf{R}^n)$ — срезающая функция, удовлетворяющая условиям $0\le\chi(\xi)\le 1$ для всех $\xi\in\mathbf{R}^n$, $\chi(\xi)=0$ при $|\xi|\le r$ и $\chi(\xi)=1$ при $|\xi|\ge r_1$ для некоторых $r_1>r>R$.

Пусть при $|\xi|\ge r_1$ выполнены следующие условия:

(i) функции $\Phi_\beta(\xi)$ удовлетворяют для всех $\xi\in\mathbf{R}^n$ неравенству (5);

(ii) для всех мультииндексов $\gamma=(\gamma_1,\gamma_2,\ldots,\gamma_n)\in\mathbf{Z}_+^n$, таких, что $\gamma_j\in\{0,1\}$, $j\in\{1,\ldots,n\}$, полином $P(\xi)$ удовлетворяет при всех $\xi\in\mathbf{R}^n$ и для некоторого $C>0$ неравенствам

$$\prod_{j=1}^n\left(1+|\xi_j|\right)^{\gamma_j}\left|D^\gamma P(\xi)\right|\le C|P(\xi)|. \tag{8}$$

Тогда $\Phi_\beta\in\overline{M_1}\left(\subset M_1\right)$ для всех мультииндексов β, таких, что $0<\beta\le\alpha$. ■

Доказательство. Будем доказывать теорему для случая $n=2$; в случае $n>2$ доказательство аналогично. Для функций $\Phi_\beta(\xi)$ мы будем проверять условия теоремы 3. Так как все эти условия, в силу теоремы Вейерштрасса, выполнены при $|\xi|\le R$ для любого $R>0$, то в дальнейшем везде будет предполагаться, что величина $|\xi|$ достаточно велика (и поэтому срезающая функция $\chi(\xi)$ не входит в запись формулы (7)), и, кроме того, через C будут обозначаться различные положительные константы.

В силу теоремы 3, для справедливости включения $\Phi_\beta\in\overline{M_1}$ достаточно показать, что из справедливости неравенств (5) и (8) следуют неравенства (6).

1. Пусть $|\xi_1|>1$, $|\xi_2|>1$. Тогда неравенство (5) эквивалентно неравенству

$$|\xi_1\xi_2|^\delta\left|\Phi_\beta(\xi)\right|\le C, \tag{9}$$

неравенства (8) — неравенствам

$$|\xi_1 D_1P(\xi)|\le C|P(\xi)|,\quad |\xi_2 D_2P(\xi)|\le C|P(\xi)|,\quad |\xi_1\xi_2 D_1D_2P(\xi)|\le C|P(\xi)|, \tag{10}$$

а неравенства (6) — неравенствам

$$|\xi_1|^{\delta+1}|\xi_2|^\delta\left|D_1\Phi_\beta(\xi)\right|\le C,\ |\xi_1|^\delta|\xi_2|^{\delta+1}\left|D_2\Phi_\beta(\xi)\right|\le C,\ |\xi_1\xi_2|^{\delta+1}\left|D_1D_2\Phi_\beta(\xi)\right|\le C. \tag{11}$$

Покажем, что из справедливости неравенств (9) и (10) следует неравенство (11).

Оценим $D_1\Phi_\beta$. Имеем:

$$\left|D_1\Phi_\beta(\xi)\right|=\left|\frac{\beta_1\xi^\beta}{\xi_1P(\xi)}-\frac{\xi^\beta}{P(\xi)}\cdot\frac{D_1P(\xi)}{P(\xi)}\right|\le C\frac{\left|\Phi_\beta(\xi)\right|}{|\xi_1|}\le\frac{C}{|\xi_1|^{\delta+1}|\xi_2|^\delta}.$$

Оценка для $D_2\Phi_\beta$ получается, если в предыдущем рассуждении поменять местами ξ_1 и ξ_2.

Аналогично оценим $D_1D_2\Phi_\beta$. Имеем:

$$\left|D_1D_2\Phi_\beta(\xi)\right|=\left|\frac{\beta_1D_2\Phi_\beta}{\xi_1}-D_2\Phi_\beta\frac{D_1P(\xi)}{P(\xi)}-\Phi_\beta\left(\frac{D_1D_2P(\xi)}{P(\xi)}-\frac{D_1P(\xi)}{P(\xi)}\frac{D_2P(\xi)}{P(\xi)}\right)\right|\le\frac{C}{|\xi_1\xi_2|^{\delta+1}}.$$

2. Пусть $|\xi_1|\le 1$, $|\xi_2|>1$. Тогда неравенство (5) эквивалентно неравенству

$$|\xi_2|^{\delta}|\Phi_\beta(\xi)| \le C, \tag{12}$$

неравенства (8) — неравенствам

$$|D_1 P(\xi)| \le C|P(\xi)|, \quad |\xi_2 D_2 P|(\xi) \le C|P(\xi)|, \quad |\xi_2 D_1 D_2 P(\xi)| \le C|P(\xi)|, \tag{13}$$

а неравенства (6) — неравенствам

$$|\xi_2|^{\delta}|D_1\Phi_\beta(\xi)| \le C, \ |\xi_2|^{\delta+1}|D_2\Phi_\beta(\xi)| \le C, \ |\xi_2|^{\delta+1}|D_1 D_2\Phi_\beta(\xi)| \le C. \tag{14}$$

Покажем, что из справедливости неравенств (12) и (13) следует неравенство (14).

Предположим, что $\beta_1 > 0$. (Случай $\beta_1 = 0$ еще проще.) Обозначая $\beta' := (\beta_1 - 1, \beta_2)$, оценим $D_1\Phi_\beta$, $D_2\Phi_\beta$ и $D_1 D_2\Phi_\beta$. Имеем:

$$|D_1\Phi_\beta(\xi)| = \left|\beta_1\Phi_{\beta'}(\xi) - \Phi_\beta(\xi)\frac{D_1 P(\xi)}{P(\xi)}\right| \le C\left[|\Phi_{\beta'}(\xi)| + |\Phi_\beta(\xi)|\right] \le \frac{C}{|\xi_2|^{\delta}};$$

$$|D_2\Phi_\beta(\xi)| = \left|\frac{\beta_2\Phi_\beta(\xi)}{\xi_2} - \Phi_\beta(\xi)\frac{D_2 P(\xi)}{P(\xi)}\right| \le C\frac{|\Phi_\beta(\xi)|}{|\xi_2|} \le \frac{C}{|\xi_2|^{\delta+1}};$$

$$|D_1 D_2\Phi_\beta(\xi)| = \left|\frac{\beta_1\beta_2\Phi_{\beta'}}{\xi_2} - \beta_1\Phi_{\beta'}\frac{D_2 P}{P} - \Phi_\beta\left(\frac{D_1 D_2 P}{P} - \frac{D_1 P}{P}\frac{D_2 P}{P}\right) - \frac{\beta_2\Phi_\beta}{\xi_2}\frac{D_1 P}{P}\right| \le \frac{C}{|\xi_2|^{\delta+1}}.$$

3. Случай $|\xi_1| > 1$, $|\xi_2| \le 1$ рассматривается аналогично предыдущему. ■

Следующая лемма, доказательство которой в неявном виде содержится в [9], показывает связь между мультипликаторами и априорными оценками. Мы приведем ее с доказательством для полноты изложения.

Лемма 1. [9] Пусть $p \in [1,\infty]$. Из включения $\Phi_\beta \in M_p$, где Φ_β — функция (7), вытекает наличие априорной оценки

$$\|D^\beta f\|_{L^p(\mathbf{R}^n)} \le C_1\|P(D)f\|_{L^p(\mathbf{R}^n)} + C_2\|f\|_{L^p(\mathbf{R}^n)}, \qquad f \in C_0^\infty(\mathbf{R}^n). \tag{15}$$

■

Доказательство. Применяя обратное преобразование Фурье к очевидному тождеству

$$\xi^\beta Ff = \Phi_\beta(\xi)P(\xi)Ff + \xi^\beta(1 - \chi(\xi))Ff,$$

для любого $f \in C_0^\infty(\mathbf{R}^n)$ имеем

$$D^\beta f = T_{\Phi_\beta}(P(D)f) + T_{\psi_\beta} f. \tag{16}$$

Здесь $\Psi_\beta(\xi) := \xi^\beta(1 - \chi(\xi))$, а T_{Φ_β} и T_{Ψ_β} — операторы свертки, определенные в начале параграфа. Операторы T_{Φ_β} и T_{Ψ_β} ограничены в $L^p(\mathbf{R}^n)$, поскольку $\Phi_\beta \in M_p$ по условию и $\Psi_\beta \in M_p$. Последнее включение вытекает из того, что $\Psi_\beta \in C_0^\infty(\mathbf{R}^n)$. Обозначая $C_1 := \|T_{\Phi_\beta}\|_{L^p(\mathbf{R}^n)}$ и $C_2 := \|T_{\Psi_\beta}\|_{L^p(\mathbf{R}^n)}$, получим оценку (15) из равенства (16). ■

3. Основная теорема. В следующей теореме предъявляется явный пример неквазиэллиптического оператора от $n \ge 2$ переменных, удовлетворяющего оценке (4).

Теорема 5. Пусть $n \ge 2$, $l := (4(n-1), 4(n-2), \ldots, 4, 2)$. Тогда оператор

$$P(D) := \left(D_1^{2(n-1)} + D_2^{2(n-2)} + \ldots + D_{n-1}^2 + iD_n\right)\left(D_1^{2(n-1)} + D_2^{2(n-2)} + \ldots + D_{n-1}^2\right) + D_n \tag{17}$$

имеет вид (1), удовлетворяет априорной оценке (4), но не является l-квазиэллиптическим. ■

Доказательство. Оператор (17) не является l–квазиэллиптическим, т.к. его l–главный символ $P^l(\xi)=\left(\xi_1^{2(n-1)}+\xi_2^{2(n-2)}+\ldots+\xi_{n-1}^2+i\xi_n\right)\left(\xi_1^{2(n-1)}+\xi_2^{2(n-2)}+\ldots+\xi_{n-1}^2\right)=0$ при $\xi=(0,0,\ldots,0,1)$.

Покажем, что оператор (17) удовлетворяет оценке (4). Для этого, в силу леммы 1, достаточно показать, что при $|\alpha:l|<1$ функции

$$\Phi_\alpha(\xi):=\chi(\xi)\frac{\xi^\alpha}{P(\xi)}\in M_1. \tag{18}$$

Для доказательства включений (18) используем теорему 4.

1. Отметим сначала, что полином $P(\xi)$ удовлетворяет условиям леммы 1 и теоремы 4. Действительно, $P(\xi)=0$ лишь при $\xi=0$, поскольку уравнение

$$P(\xi)=\left(\xi_1^{2(n-1)}+\xi_2^{2(n-2)}+\ldots+\xi_{n-1}^2+i\xi_n\right)\left(\xi_1^{2(n-1)}+\xi_2^{2(n-2)}+\ldots+\xi_{n-1}^2\right)+\xi_n=0$$

эквивалентно системе $\begin{cases}\left(\xi_1^{2(n-1)}+\xi_2^{2(n-2)}+\ldots+\xi_{n-1}^2\right)^2+\xi_n=0\\ \xi_n\left(\xi_1^{2(n-1)}+\xi_2^{2(n-2)}+\ldots+\xi_{n-1}^2\right)=0\end{cases}$, имеющей только тривиальное решение $\xi_1=\xi_2=\ldots=\xi_n=0$. Проверим также, что он удовлетворяет неравенствам (8) из теоремы 4.

Обозначим

$$Q(\xi)=\xi_1^{2(n-1)}+\xi_2^{2(n-2)}+\ldots+\xi_{n-1}^2+i\xi_n,$$

так что $P(\xi)=Q(\xi)\left(\xi_1^{2(n-1)}+\xi_2^{2(n-2)}+\ldots+\xi_{n-1}^2\right)+\xi_n$ Очевидно, полином $Q(\xi)$ является l'–квазиэллиптическим при $l'=(2(n-1),2(n-2),\ldots,2,1)$. Для таких полиномов неравенства (8) выполнены (см. [9]). Далее,. Мы ограничимся проверкой для производных первого и второго порядка; проверка для производных высших порядков совершенно аналогична. Так как переменные $\xi_1,\ldots,\xi_{n-1}$ в записи полинома $P(\xi)$ «равноправны», то достаточно проверить неравенства (7), например, для производных D_1, D_n, D_1D_2 и D_1D_n.

Оценим D_1P. Имеем:

$$\frac{(1+|\xi_1|)|D_1P(\xi)|}{|P(\xi)|}\le\frac{C(1+|\xi_1|)|D_1Q(\xi)|}{|Q(\xi)|}+\frac{C(1+|\xi_1|)|\xi_1|^{2n-3}|Q(\xi)|}{|Q(\xi)|\left(\xi_1^{2(n-1)}+\xi_2^{2(n-2)}+\ldots+\xi_{n-1}^2\right)+|\xi_n|}.$$

Предпоследняя дробь оценивается константой в силу соответствующего неравенства (8) для полинома $Q(\xi)$. Последняя дробь при $|\xi_1|>1$ оценивается константой, а при $|\xi_1|\le1$ — дробью $\dfrac{C}{\xi_1^{2(n-1)}+\xi_2^{2(n-2)}+\ldots+\xi_{n-1}^2+|\xi_n|\cdot|Q(\xi)|^{-1}}$, знаменатель которой ограничен снизу при больших $|\xi|$.

Оценим D_nP. Имеем:

$$\frac{(1+|\xi_n|)|D_nP(\xi)|}{|P(\xi)|}\le\frac{C(1+|\xi_n|)|D_nQ(\xi)|}{|Q(\xi)|}+\frac{C(1+|\xi_n|)}{|Q(\xi)|\left(\xi_1^{2(n-1)}+\xi_2^{2(n-2)}+\ldots+\xi_{n-1}^2\right)+|\xi_n|}.$$

Доказательство того, что две последние дроби ограничены сверху, проводится так же, как и в предыдущем случае.

Оценим D_1D_2P. Имеем:

$$\frac{(1+|\xi_1|)(1+|\xi_2|)|D_1D_2P(\xi)|}{|P(\xi)|}\le\frac{C(1+|\xi_1|)(1+|\xi_2|)|D_1D_2Q(\xi)|}{|Q(\xi)|}+$$

$$\frac{C(1+|\xi_1|)|D_1Q(\xi)|}{|Q(\xi)|}\cdot\frac{(1+|\xi_2|)|\xi_2|^{2n-5}}{|P(\xi)|}+\frac{C(1+|\xi_2|)|D_2Q(\xi)|}{|Q(\xi)|}\cdot\frac{(1+|\xi_1|)|\xi_2|^{2n-3}}{|P(\xi)|}$$

(если $2n-5<0$, то соответствующее слагаемое в сумме отсутствует). Три последние дроби оцениваются так же, как и раньше. Наконец, производная D_1D_nP оценивается аналогичным образом. Таким образом, неравенства (8) для полинома $P(\xi)$ выполнены.

2. Покажем, что функции (18) удовлетворяют неравенствам (5) для случая $\alpha_n=0$.

Нетрудно видеть, что при больших $|\xi|$ полином $P(\xi)$ удовлетворяет неравенству

$$|P(\xi)|\ge C_1|Q(\xi)|\left(\xi_1^{2(n-1)}+\xi_2^{2(n-2)}+\ldots+\xi_{n-1}^2\right)+C_2|\xi_n|. \qquad (19)$$

Выполняя замену переменных

$$\eta_1=\xi_1^{n-1},\quad \eta_2=\xi_2^{n-2},\ \ldots\ ,\eta_{n-1}=\xi_{n-1},\quad \eta_n=\xi_n,$$

затем замечая, что $\left(1+|\eta_j|^{1/(n-j)}\right)^\delta\le C\left(1+|\eta_j|\right)^\delta$ при всех $j\in\{1,2,\ldots,n-1\}$ и учитывая (19), придем к неравенству

$$|\eta^\beta|\prod_{j=1}^n\left(1+|\eta_j|\right)^\delta\le C_1\left(\eta_1^4+\eta_2^4+\ldots+\eta_{n-1}^4\right)+C_2|\eta_n|, \qquad (20)$$

где $\beta_1:=\dfrac{\alpha_1}{n-1},\beta_2:=\dfrac{\alpha_2}{n-2},\ldots,\beta_{n-1}:=\alpha_{n-1},\beta_n:=\alpha_n=0$, $\eta^\beta:=\eta_1^{\beta_1}\eta_2^{\beta_2}\ldots\eta_n^{\beta_n}$ и $|\eta|$ достаточно велико. Здесь мультииндекс $\beta=(\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_n)$ (с неотрицательными, но не обязательно целыми компонентами) удовлетворяет условиям

$$\beta_1+\beta_2+\ldots+\beta_{n-1}<4,\qquad \beta_n=0. \qquad (21)$$

Можно считать, что в неравенстве (20) $|\eta_j|>1$ при всех $j\in\{1,2,\ldots,n-1\}$. В самом деле, если $|\eta_j|\le 1$ для некоторого $j\in\{1,2,\ldots,n-1\}$, то, заменяя η_j в левой части (20) единицей, а в правой — нулем, получим более сильное неравенство такого же вида с меньшим числом переменных. Будем также считать, что $|\eta_n|>1$ (в случае $|\eta_n|\le 1$ рассуждение еще проще). При этих предположениях неравенство (20) будет равносильно неравенству

$$|\eta^\beta|\prod_{j=1}^n|\eta_j|^\delta\le C_1\left(\eta_1^4+\eta_2^4+\ldots+\eta_{n-1}^4\right)+C_2|\eta_n|, \qquad (22)$$

где мультииндекс β удовлетворяет условиям (21).

Положим

$$\rho:=\sqrt{\eta_1^2+\eta_2^2+\cdots+\eta_{n-1}^2}\ \ (>1),\qquad \overline{\eta_j}:=\eta_j/\rho,\qquad j\in\{1,2,\ldots,n-1\}.$$

Подставляя выражения η_j через ρ в (22) и учитывая, что $|\overline{\eta_j}|>1$ при $j\in\{1,2,\ldots,n-1\}$, получим более сильное неравенство

$$\rho^{\beta_1+\beta_2+\ldots+\beta_{n-1}+(n-1)\delta}\cdot|\eta_n|^\delta\le C\left[\rho^4+|\eta_n|\right].$$

Далее, переобозначая

$$\delta':=(n-1)\delta,\qquad t:=\beta_1+\beta_2+\ldots+\beta_{n-1},\qquad x:=\rho,\qquad y:=|\eta_n|,$$

приходим к следующей задаче: нужно доказать, что при $0\le t<4$ и малых $\delta'>0$ функция

$$F_t(x,y):=\frac{x^{t+\delta'}y^{\delta'}}{x^4+y}$$

ограничена сверху на множестве $x,y>1$. Допустим, что это не так. Тогда существуют последовательности чисел $\{x_m\}_1^\infty$ и $\{y_m\}_1^\infty$, для которых $\lim_{m\to\infty}F_t(x_m,y_m)=\infty$ и $x_m,y_m>1$ при всех $m=1,2,\ldots$. Так как $F_t(x_m,y_m)=\left[\dfrac{x_m^{4-t-\delta'}}{y_m^{\delta'}}+\dfrac{y_m^{1-\delta'}}{x_m^{t+\delta'}}\right]^{-1}$ и обе последние дроби положительны, то

$$\lim_{m\to\infty}\frac{x_m^{4-t-\delta'}}{y_m^{\delta'}}=0 \qquad \text{и} \qquad \lim_{m\to\infty}\frac{y_m^{1-\delta'}}{x_m^{t+\delta'}}=0. \tag{23}$$

Показатели степеней в (23) положительны при достаточно малых $\delta'>0$ (именно, при $\delta'<4-t$ и $\delta'<1$). Так как $x_m, y_m>1$, то из (23) вытекает, что

$$\lim_{m\to\infty}x_m=\infty \qquad \text{и} \qquad \lim_{m\to\infty}y_m=\infty. \tag{24}$$

С другой стороны, из (23) также следует, что при любом $u>0$

$$\lim_{m\to\infty}\left[\left(\frac{x_m^{4-t-\delta'}}{y_m^{\delta'}}\right)^u\left(\frac{y_m^{1-\delta'}}{x_m^{t+\delta'}}\right)\right]=\lim_{m\to\infty}\left[x_m^{u(4-t-\delta')-(t+\delta')}y_m^{1-\delta'-u\delta'}\right]=0. \tag{25}$$

Если $\delta'<1$ и $\delta'<\frac{4-t}{5}$, то $0<\frac{t+\delta'}{4-t-\delta'}<\frac{1-\delta'}{\delta'}$. Выберем u из условия $\frac{t+\delta'}{4-t-\delta'}<u<\frac{1-\delta'}{\delta'}$. Тогда $u(4-t-\delta')-(t+\delta')>0$ и $1-\delta'-u\delta'>0$, т.е. оба показателя степени при x_m и y_m в равенстве (25) положительны, что противоречит соотношениям (24).

Таким образом, доказано, что функции (18) принадлежат $\overline{M}_1$ в случае $\alpha_n=0$ и $|\alpha:l|<1$.

3. Пусть, наконец, $\alpha_n=1$ и $|\alpha:l|<1$. Тогда $\frac{\alpha_1}{n-1}+\frac{\alpha_2}{n-2}+\ldots+\alpha_{n-1}<4$. Пусть $P(\xi)=c_0\xi_n+\ldots$, где $c_0\neq 0$ и члены, обозначенные многоточием, не содержат ξ_n. Функции

$$\overline{\Phi_\alpha}(\xi):=\chi(\xi)\frac{\xi_1^{\alpha_1}\xi_2^{\alpha_2}\cdots\xi_{n-1}^{\alpha_{n-1}}}{c_0\left(\xi_1^{2(n-1)}+\xi_2^{2(n-2)}+\ldots+\xi_{n-1}^2\right)+1}\in M_1\left(\mathbf{R}^{n-1}\right)\subset M_1\left(\mathbf{R}^n\right),$$

поскольку полином, стоящий в знаменателе последней дроби, является квазиэллиптическим относительно $(n-1)$–мерного вектора $(2(n-1),2(n-2),\ldots,2)$. Разность $\Phi_\alpha(\xi)-\overline{\Phi_\alpha}(\xi)$ будет суммой дробей вида (18), для которых $\alpha_n=0$ и, по доказанному, $\Phi_\alpha-\overline{\Phi_\alpha}\in\overline{M}_1\subset M_1$. Отсюда $\Phi_\alpha\subset M_1$. ■

4. Выводы. В работе получена новая теорема, дающая достаточные условия для принадлежности к классу мультипликаторов в пространстве $C(\mathbf{R}^n)$ функций, являющихся «срезанными» в окрестности начала координат рациональными дробями. Этот результат применяется для доказательства существования множества априорных оценок для конкретного неквазиэллиптического оператора. Наличие примера такого оператора обосновывает точность полученного ранее аналога критерия де Лю и Миркила для операторов с квазиоднородной главной частью.

РЕЗЮМЕ

У роботі описано достатні умови для одного класу мультиплікаторів в $C(\mathbf{R}^n)$. Використовуючи цей результат, доведено апріорні оцінки для конкретного неквазіеліптичного оператора.

SUMMARY

In the paper we describe sufficient conditions for one class of multipliers in $C(\mathbf{R}^n)$. Applying this result a priori estimates for a concrete nonquasielliptic operator are proved.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бесов О.В., Ильин В.П., Никольский С.М. Интегральные представления функций и теоремы вложения. – М.: Наука, 1996. – 480 с.
2. Волевич Л.Р., Гиндикин С.Г. Метод многогранника Ньютона в теории дифференциальных уравнений в частных производных // Труды ММО. – 1985. – Т.48. – С.211-262.

3. Маламуд М.М. Оценки для систем минимальных и максимальных дифференциальных операторов в $L_p(\Omega)$ // Труды ММО. – 1995. – Т.56. – С.206-261.
4. De Leeuw K., Mirkil H. A priori estimates for differential operators in L_∞ norm // Illinois J. Math. 1964. V.8. No.3. P.112-124.
5. Лиманский Д.В. Условия подчиненности для систем минимальных и максимальных дифференциальных операторов в пространствах $L^p(\Omega)$ // Дисс. на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук. – Донецк, 2004. – 133 с.
6. Лиманский Д.В., Маламуд М.М. О слабой коэрцитивности систем дифференциальных операторов в L^1 и L^∞ // Доклады Академии наук. – 2004. – Т.397. – №4. – С.453-458.
7. Лиманский Д.В., Маламуд М.М. Слабо коэрцитивные неквазиэллиптические системы дифференциальных операторов в $W_p^l(\mathbf{R}^n)$ // Доклады Академии наук. – 2007. – Т.415. – №5. – С.583-588.
8. Стейн И., Вейс Г. Введение в гармонический анализ на евклидовых пространствах. – М.: Мир, 1973. – 344 с.
9. Belinsky E.S., Dvejrin M.Z., and Malamud M.M. Multipliers in L_1 and estimates for systems of differential operators // Russian Journal of Math. Phys. 2005. V.12. №1. – P.6-16.
10. Boman J. Supremum norms for partial derivatives of functions of several real variables // Illinois J. Math. 1972. V.16. No.2. – P.203-216.

Надійшла до редакції 30.11.2007 р.

УДК 519.21

ДВЕ ЗАДАЧИ ОПТИМАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РЕСУРСОВ В ИЗБИРАТЕЛЬНОЙ КАМПАНИИ

Б.В.Бондарев, Е.Ю.Рагулина

Введение. Политические институты типа парламента играют важную роль практически во всех сферах общественной жизни во многих странах. Формирование этих институтов является результатом избирательной кампании, в ходе которой политическая реклама может существенно влиять на предпочтения избирателей. Поэтому большой интерес представляет проблема оптимального распределения информационных ресурсов, которая в данной работе рассматривается с точки зрения двух игроков: Власти (политической силы, контролирующей правительство на момент выборов) и Оппозиции (политической силы, интересы которой прямо противоположны интересам Власти). Целью каждой из сторон является получение доли голосов, которая позволила бы сформировать необходимое большинство в парламенте. Следует отметить, что данная проблема рассматривалась ранее в несколько другой постановке [1].

1. Задача оптимального распределения фиксированного объёма информационных ресурсов.

1.1. Постановка задачи. Рассматривается государство, в котором Власть представлена s политическими партиями, и частный конфликт между Властью и Оппозицией, состоящий в том, что Оппозиция стремится снизить рейтинги этих s партий, в то время как Власть пытается максимально защититься от дискредитации с целью сохранения уже имеющихся своих сторонников. (Заметим, что аналогично можно рассматривать противоположную задачу, когда Оппозиция пытается противостоять дискредитации со стороны Власти.) Для дискредитации Власти Оппозиция имеет в своём распоряжении N однотипных единиц антирекламы. Для защиты от дискредитации у Власти имеется M однотипных единиц рекламы. Под единицей рекламы (антирекламы) будем понимать некоторый её достаточно малый объём, неделимый для упрощения дальнейших расчётов. Кроме того, будем предполагать, что каждая единица рекламы (антирекламы) обладает одинаковой эффективностью, и рассматривать только ту рекламу, которая позволяет сохранить уже имеющийся рейтинг. Предполагается также, что ни одна из сторон не располагает информацией о распределении имеющихся средств другой стороной, зная при этом только их общее количество, т.е. M и N. Это означает, что обе стороны одновременно и независимо друг от друга определяют свои стратегии и в дальнейшем не могут их изменить. Задача состоит в оптимальном распределении этих ресурсов, т.е. выборе таких стратегий для обеих сторон, при которых Оппозиция сможет максимально возможно снизить рейтинг Власти, а Власть – минимизировать наносимый ущерб.

1.2. Основной результат. Пусть на данный момент каждая провластная партия имеет A_j сторонников $(j = 1,2,...,s)$. Оппозиция распределяет свои информационные ресурсы так, что каждая единица антирекламы может быть направлена на дискредитацию любой из s партий и независимо от других, предназначенных для дискредитации этой партии, меняет решение избирателя, поддерживающего партию j, с вероятностью ω_j в случае бездействия рекламы партии j. Каждая единица рекламы партии j независимо от других защищает её от действия одной единицы антирекламы с вероятностью ε_j. Величины ε_j характеризуют в некотором смысле эффективность рекламы Власти относительно антирекламы Оппозиции, а ω_j – уровень убеждённости приверженцев партии j. Пусть $X = (x_1, x_2, ..., x_s)$ – вектор распределения ресурсов Власти, при котором на рекламу партии j выделено x_j единиц $(j = 1,2,...,s)$, $\sum_{j=1}^{s} x_j = M$. Аналогично $Y = (y_1, y_2, ..., y_s)$ – вектор распределения ресурсов Оппозиции, $\sum_{j=1}^{s} y_j = N$. Тогда функция ущерба Власти от дискредитации запишется в виде

$$U(X,Y) = \sum_{j=1}^{s} U_j(x_j, y_j) = \sum_{j=1}^{s} A_j\left(1 - \left(1 - \left(1 - \varepsilon_j\right)^{\frac{x_j}{y_j}} \omega_j\right)^{y_j}\right),$$

© Бондарев Б.В., Рагулина Е.Ю.

где $U_j(x_j, y_j)$ – ущерб партии j, при этом Власть будет стремиться к её минимизации, а Оппозиция – максимизации [2].

Утверждение 1. Множество стратегий Оппозиции состоит из C_{N+s-1}^{s-1} элементов как числа возможных вариантов распределения N однотипных единиц антирекламы по s партиям.

Доказательство. ▶Пусть K_N^s – возможное количество вариантов распределения N однотипных единиц антирекламы по s партиям, тогда $K_N^s = \sum_{i=1}^{s} C_s^i R_N^i$, где C_s^i – число сочетаний из s по i; R_N^i – число вариантов распределения N единиц антирекламы по s партиям так, чтобы на каждую было выделено не менее одной единицы.

Формулу для числа вариантов R_N^i найдём методом индукции:

$$R_N^1 = 1 = C_{N-1}^0,$$

$$R_N^2 = N - 1 = C_{N-1}^1,$$

$$R_N^3 = \sum_{k=1}^{N-2} R_{N-k}^2 = \sum_{k=1}^{N-2} (N-k-1) = (N-1)(N-2) - \sum_{k=1}^{N-2} k = (N-1)(N-2) - \frac{1}{2}(N-1)(N-2) = C_{N-1}^2,$$

аналогично

$$R_N^4 = C_{N-1}^3, \qquad R_N^i = C_{N-1}^{i-1}, \qquad R_N^s = C_{N-1}^{s-1}.$$

Тогда

$$K_N^s = \sum_{i=1}^{s} C_s^i C_{N-1}^{i-1} = \sum_{i=1}^{s} C_s^i R_{N-1}^{N-i}.$$

Из факториально-биномиальной теоремы следует, что $\sum_{i=1}^{s} C_s^i R_{N-1}^{N-i} = C_{N+s-1}^N$, поэтому $K_N^s = C_{N+s-1}^N = C_{N+s-1}^{s-1}$.◀

Замечание. Аналогично доказывается, что множество стратегий Власти состоит из C_{M+s-1}^{s-1} элементов.

Обозначим для удобства $m = C_{M+s-1}^{s-1}$, $n = C_{N+s-1}^{s-1}$; $X_1, X_2, ..., X_m$ – всевозможные стратегии Власти; $Y_1, Y_2, ..., Y_n$ – всевозможные стратегии Оппозиции. Тогда получим матрицу всевозможных исходов:

$Y \setminus X$	X_1	…	X_i	…	X_m
Y_1	$U(X_1, Y_1)$	…	$U(X_i, Y_1)$	…	$U(X_m, Y_1)$
…	…	…	…	…	…
Y_j	$U(X_1, Y_j)$	…	$U(X_i, Y_j)$	…	$U(X_m, Y_j)$
…	…	…	…	…	…
Y_n	$U(X_1, Y_n)$	…	$U(X_i, Y_n)$	…	$U(X_m, Y_n)$

Из основной теоремы теории матричных игр известно, что для любой матрицы существует решение игры в смешанных стратегиях, отклонение от которого не даёт дополнительного выигрыша [3], [4], поэтому и Власти, и Оппозиции необходимо придерживаться этих стратегий. Но с ростом M, N, s размеры матрицы растут очень быстро и, получив решение игры в смешанных стратегиях, например, симплекс-методом (если его не существует в чистых стратегиях), необходимо смоделировать случайную величину с заданным распределением, но полученные вероятности очень малы и возможна погрешность при округлении, что может привести к выбору абсолютно другой стратегии. Кроме того, нахождение самих оптимальных смешанных стратегий довольно затруднительно.

В качестве альтернативы можно было бы найти закон распределения для одной единицы информации из того же условия существования решения игры в смешанных стратегиях. Пусть p_i – вероятность того, что единица рекламы будет выделена Властью на партию i, $i = 1,...,s$; q_j – вероятность того, что единица антирекламы будет выделена Оппозицией на партию j, $j = 1,...,s$. Тогда случайная величина, множество значений которой – всевозможные стратегии Власти (Оппозиции), распределена по полиномиальному закону с соответствующими параметрами. Далее следует искать вероятности p_i, q_j, при которых для вышеуказанной матрицы максимин равен минимаксу, т.е. искать решение игры не в произвольном виде (такое всегда существует), а среди векторов из полиномиального распределения. В этом случае гораздо проще моделировать случайные величины, принимающие только s различных значений. Но оказывается, что не для любой матрицы существует решение игры в смешанных стратегиях среди векторов из этого класса, как показывает следующий пример.

Контрпример. ▶Пусть в принятых выше обозначениях $s = 2$, $M = 2$, $N = 2$; p_1 – вероятность того, что Власть выделит единицу рекламы на I партию, $p_2 = 1 - p_1$ – вероятность того, что Власть выделит единицу рекламы на II партию; q_1 – вероятность того, что Оппозиция выделит единицу антирекламы на I партию; $q_2 = 1 - q_1$ – вероятность того, что Оппозиция выделит единицу антирекламы на II партию. Тогда множество стратегий Власти состоит из трёх элементов: $(2;0)$, $(1;1)$, $(0;2)$. Эти стратегии применяются с вероятностями p_1^2, $2p_1p_2$, p_2^2 соответственно. Аналогичное множество стратегий есть и у Оппозиции, при этом они применяются с вероятностями q_1^2, $2q_1q_2$, q_2^2 соответственно. Пусть задана матрица возможных ущербов:

$Y \setminus X$	$(2;0)$ p_1^2	$(1;1)$ $2p_1p_2$	$(0;2)$ p_2^2
$(2;0)$ q_1^2	1	2	5
$(1;1)$ $2q_1q_2$	2	1	4
$(0;2)$ q_2^2	3	2	1

Пусть v – цена игры в смешанных стратегиях, тогда решение игры удовлетворяет обеим системам неравенств одновременно [3]:

$$\begin{cases} p_1^2 + 4p_1p_2 + 5p_2^2 \le v, \\ 2p_1^2 + 2p_1p_2 + 4p_2^2 \le v, \\ 3p_1^2 + 4p_1p_2 + p_2^2 \le v, \\ p_1 + p_2 = 1, \end{cases} \qquad \begin{cases} q_1^2 + 4q_1q_2 + 3q_2^2 \ge v, \\ 2q_1^2 + 2q_1q_2 + 2q_2^2 \ge v, \\ 5q_1^2 + 8q_1q_2 + q_2^2 \ge v, \\ q_1 + q_2 = 1. \end{cases}$$

Исключив переменные p_2 и q_2 из систем, получим:

$$\begin{cases} p_1^2 + 4p_1(1-p_1) + 5(1-p_1)^2 \le v, \\ 2p_1^2 + 2p_1(1-p_1) + 4(1-p_1)^2 \le v, \\ 3p_1^2 + 4p_1(1-p_1) + (1-p_1)^2 \le v, \end{cases} \qquad \begin{cases} q_1^2 + 4q_1(1-q_1) + 3(1-q_1)^2 \ge v, \\ 2q_1^2 + 2q_1(1-q_1) + 2(1-q_1)^2 \ge v, \\ 5q_1^2 + 8q_1(1-q_1) + (1-q_1)^2 \ge v, \end{cases}$$

или после упрощения

$$\begin{cases} 5 - 6p_1 + 2p_1^2 \le v, \\ 4 - 6p_1 + 4p_1^2 \le v, \\ 1 + 2p_1 \le v, \end{cases} \qquad \begin{cases} 3 - 2q_1 \ge v, \\ 2 - 2q_1 + 2q_1^2 \ge v, \\ 1 + 6q_1 + 14q_1^2 \ge v. \end{cases}$$

Если изобразить графически множества значений переменных p_1, q_1 и v, удовлетворяющие обеим системам и ограничениям $0 \le p_1 \le 1$, $0 \le q_1 \le 1$, то из первой системы следует $v > 2$, а из второй – $v < 2$, т.е. не существует таких значений v, которые удовлетворяли бы обеим системам одновременно. Следовательно, не существует и решения игры в смешанных стратегиях среди векторов указанного вида.◀

Таким образом, поскольку не всегда можно найти закон распределения для одной единицы информации, то необходимо искать другие подходы к численному решению задачи. Пусть Власть применяет свою стратегию X_i с вероятностью p_i, $i = 1,2,...,m$, а Оппозиция – стратегию Y_i с вероятностью q_j, $j = 1,2,...,n$. Поскольку вероятности p_i и q_i очень малы, то при моделировании из-за округления значений случайной величины возможен выбор другой стратегии. Поэтому большое значение имеет то, в каком порядке будут расположены стратегии X_i и Y_i в матрице. Необходимо, чтобы стратегии в соседних строках (столбцах) отличались как можно меньше. Это достигается, например, следующим образом.

Оптимальный способ упорядочивания стратегий в матрице. ▶Все рассуждения будем проводить для всевозможных стратегий Власти (для Оппозиции рассуждения аналогичны) методом математической индукции по числу партий. Кроме того, будем считать, что стратегии упорядочены оптимально, если каждые две соседние из них отличаются перебрасыванием одной единицы рекламы.

Случай $s = 2$:

$$X_1 = (0,M) \Rightarrow X_2 = (1,M-1) \Rightarrow X_3 = (2,M-2) \Rightarrow ... \Rightarrow X_{m-1} = (M-1,1) \Rightarrow X_m = (M,0).$$

Случай $s = 3$:

Зафиксируем первую координату вектора $x_1 = 0$ и рассмотрим всевозможные способы распределения M единиц между второй и третьей координатами, что сводится к случаю $s = 2$. Таким образом, мы переберём все варианты, когда на первую партию ресурсы не выделяются. Последней такой стратегией будет вектор $(0,M,0)$. Затем перебросим одну единицу со второй партии на первую и при фиксированном $x_1 = 1$ будем распределять оставшуюся $M-1$ единицу между второй и третьей партиями (случай $s = 2$ в обратном порядке). Затем фиксируем $x_1 = 2$ и т.д.; последней будет стратегия $(M,0,0)$. Таким образом, векторы будут расположены в следующем порядке:

$$(0,0,M) \Rightarrow (0,1,M-1) \Rightarrow (0,2,M-2) \Rightarrow ... \Rightarrow (0,M-1,1) \Rightarrow (0,M,0) \Rightarrow$$
$$\Rightarrow (1,M-1,0) \Rightarrow (1,M-2,1) \Rightarrow ... \Rightarrow (1,0,M-1) \Rightarrow (2,0,M-2) \Rightarrow (2,1,M-3) \Rightarrow ...$$
$$... \Rightarrow (2,M-2,0) \Rightarrow ... \Rightarrow (M-1,0,1) \Rightarrow (M-1,1,0) \Rightarrow (M,0,0).$$

Геометрическая интерпретация в трёхмерном случае: если ввести в трёхмерном пространстве систему координат и откладывать по осям соответствующие количества единиц рекламы, выделенные на каждую партию, то всевозможные стратегии – точки с целочисленными координатами, лежащие в части плоскости $x_1 + x_2 + x_3 = M$, ограниченной координатными плоскостями.

Случай $s = 4$:

Зафиксируем первую координату вектора $x_1 = 0$; для остальных трёх координат применяем случай $s = 3$. Затем перебрасываем одну единицу рекламы на первую координату и при фиксированном $x_1 = 1$ применяем случай $s = 3$ и т.д.:

$$(0,0,0,M) \Rightarrow (0,0,1,M-1) \Rightarrow ... \Rightarrow (0,M-1,1,0) \Rightarrow (0,M,0,0) \Rightarrow (1,M-1,0,0) \Rightarrow$$
$$\Rightarrow (1,M-2,1,0) \Rightarrow ... \Rightarrow (1,0,0,M-1) \Rightarrow ... \Rightarrow (M,0,0,0).$$

Случай произвольного s:

Фиксируем первую координату $x_1 = 0$; для остальных координат применяем случай $s-1$, после чего увеличиваем x_1 на единицу и применяем случай $s-1$ и т.д.

Поскольку на каждом шаге мы перебрасываем только одну единицу рекламы, то рядом расположенные стратегии не будут существенно различаться.◀

Предположим, что все стратегии обеих сторон упорядочены в матрице указанным способом. Разобьём множество векторов $\{x_i\}_{i=1}^{m}$ на k подмножеств:

$$X_1^* = \{X_1, X_2, ..., X_{r_1}\}, \quad X_2^* = \{X_{r_1+1}, ..., X_{r_2}\}, \ ..., \quad X_k^* = \{X_{r_{k-1}+1}, ..., X_m\}$$

(приблизительно по одинаковому количеству векторов для упрощения расчётов), а множество векторов $\{y_j\}_{j=1}^{n}$ – на l подмножеств:

$$Y_1^* = \{Y_1, Y_2, ..., Y_{t_1}\}, \ ..., \quad Y_l^* = \{Y_{t_{l-1}+1}, ..., Y_n\}.$$

Тогда вся матрица размера $(m \times n)$ разобьётся на kl матриц меньших размеров (блоков).

При практическом применении полученных результатов сначала следует моделировать случайную величину с вектором распределения $(p_1^*, p_2^*, ..., p_k^*)$ (или $(q_1^*, q_2^*, ..., q_l^*)$) где p_i^* - вероятность попадания в блок X_i^*. Пусть, например, эта случайная величина приняла значение, соответствующее вероятности p_i^*, тогда на следующем шаге моделируется случайная величина с вектором распределения $\left(p_{r_{i-1}}', ..., p_{r_i}'\right)$, где p_j' - вероятность выбрать данную стратегию при условии, что выбран блок X_i^*. Другими словами, на первом шаге выбирается блок, которому принадлежит применяемая стратегия, а на втором – конкретная стратегия внутри выбранного блока.

Кроме того, при таком расположении стратегий в матрице можно исключать некоторые из них из рассмотрения с целью уменьшения размеров матрицы.

2. Задача оптимального распределения бюджетов сторон во времени.

2.1. Постановка задачи. Пусть имеются две конфликтующие стороны, Власть и Оппозиция, интересы которых прямо противоположны. Каждая из сторон, имея в своём распоряжении фиксированный бюджет, стремится так распределить его во времени, чтобы максимально повысить свой рейтинг (число сторонников) и тем самым понизить рейтинг противоположной стороны. Будем считать, что общее число избирателей остаётся постоянным в течение предвыборной кампании, а неопределившиеся избиратели отсутствуют. Пусть весь срок предвыборной кампании разбит на n равных периодов, в течение которых рейтинги сторон не меняются и зависят от количества средств, вложенных на предыдущих этапах. Отметим, что с увеличением числа периодов распределение средств будет более точным, но в то же время период не должен быть слишком коротким, чтобы успеть использовать выделенные на него средства. Будем рассматривать линейную модель, т.е. предполагать, что количество избирателей, изменивших свой выбор, пропорционально количеству вложенных средств. Кроме того, будем считать, что ни одна из сторон не располагает информацией о распределении средств другой стороной. Таким образом, необходимо определить оптимальные вложения средств для сторон на каждом этапе.

2.2. Нахождение оптимальных стратегий сторон без учёта действия рекламы на предыдущих этапах. Пусть на момент начала предвыборной кампании Власть имеет A сторонников, а Оппозиция – B. Обозначим A_i и B_i – численности сторонников Власти и Оппозиции соответственно после i-го периода вложения средств ($i = 1,2,...,n$, где n – общее количество периодов в предвыборной кампании). Пусть a и b – бюджеты Власти и Оппозиции соответственно, выделяемые на предвыборную кампанию; a_i и b_i – средства, выделяемые Властью и Оппозицией соответственно на i-й период, причём $\sum_{i=1}^{n} a_i = a$ и $\sum_{i=1}^{n} b_i = b$; α и β – коэффициенты эффективности вложенных средств для Власти и Оппозиции соответственно ($\alpha, \beta > 0$; $\alpha, \beta = const$). Будем считать, что $\alpha a + \beta b < 1$. Тогда с учётом принятых обозначений $A\beta b_1$ – число сторонников Власти, перешедших на сторону Оппозиции после 1-го периода, $B\alpha a_1$ – число сторонников Оппозиции, перешедших на сторону Власти после 1-го периода, а численности сторонников Власти и Оппозиции соответственно равны

$$A_1 = A - A\beta b_1 + B\alpha a_1 = A(1 - \beta b_1) + B\alpha a_1,$$
$$B_1 = B - B\alpha a_1 + A\beta b_1 = B(1 - \alpha a_1) + A\beta b_1.$$

Аналогично после 2-го периода имеем

$$A_2 = A_1(1 - \beta b_2) + B_1\alpha a_2 = (A(1 - \beta b_1) + B\alpha a_1)(1 - \beta b_2) + (B(1 - \alpha a_1) + A\beta b_1)\alpha a_2,$$

$$B_2 = B_1(1-\alpha a_2)+A_1\beta b_2 = \big(B(1-\alpha a_1)+A\beta b_1\big)(1-\alpha a_2)+\big(A(1-\beta b_1)+B\alpha a_1\big)\beta b_2.$$

Выведем общую формулу для числа сторонников Власти после n-го периода (это и будет целевая функция), а число сторонников Оппозиции будет определяться как разность количества всех избирателей и числа сторонников Власти:

$$A_1 = A(1-\beta b_1)+B\alpha a_1 = A(1-\beta b_1-\alpha a_1)+(A+B)\alpha a_1;$$

$$A_2 = A_1(1-\beta b_2)+B_1\alpha a_2 = A_1(1-\beta b_2)+(A+B-A_1)\alpha a_2 = A_1(1-\beta b_2-\alpha a_2)+(A+B)\alpha a_2 =$$
$$= A(1-\beta b_1-\alpha a_1)(1-\beta b_2-\alpha a_2)+(A+B)\alpha a_1(1-\beta b_2-\alpha a_2)+(A+B)\alpha a_2;$$

$$A_3 = A_2(1-\beta b_3)+B_2\alpha a_3 = A_2(1-\beta b_3-\alpha a_3)+(A+B)\alpha a_3 =$$
$$= A(1-\beta b_1-\alpha a_1)(1-\beta b_2-\alpha a_2)(1-\beta b_3-\alpha a_3)+(A+B)\alpha a_1(1-\beta b_2-\alpha a_2)(1-\beta b_3-\alpha a_3)+$$
$$+(A+B)\alpha a_2(1-\beta b_3-\alpha a_3)+(A+B)\alpha a_3;$$

$$A_4 = A_3(1-\beta b_4)+B_3\alpha a_4 = A_3(1-\beta b_4-\alpha a_4)+(A+B)\alpha a_4 =$$
$$= A(1-\beta b_1-\alpha a_1)(1-\beta b_2-\alpha a_2)(1-\beta b_3-\alpha a_3)(1-\beta b_4-\alpha a_4)+$$
$$+(A+B)\alpha a_1(1-\beta b_2-\alpha a_2)(1-\beta b_3-\alpha a_3)(1-\beta b_4-\alpha a_4)+$$
$$+(A+B)\alpha a_2(1-\beta b_3-\alpha a_3)(1-\beta b_4-\alpha a_4)+(A+B)\alpha a_3(1-\beta b_4-\alpha a_4)+(A+B)\alpha a_4;$$

.....

$$A_n = A\cdot\prod_{i=1}^{n}(1-\beta b_i-\alpha a_i)+\sum_{k=1}^{n-1}(A+B)\alpha a_k\cdot\prod_{j=k+1}^{n}(1-\beta b_j-\alpha a_j)+(A+B)\alpha a_n.$$

Рассмотрим частный случай $n=2$ и найдём для него оптимальные стратегии. С учётом того, что $a_2 = a-a_1$ и $b_2 = b-b_1$, число сторонников Власти на момент выборов равно

$$A_2 = A_1(1-\beta b_2)+B_1\alpha a_2 = \big(A(1-\beta b_1)+B\alpha a_1\big)(1-\beta b_2)+\big(B(1-\alpha a_1)+A\beta b_1\big)\alpha a_2 =$$
$$= A(1-\beta b_1)(1-\beta b_2)+B\alpha a_1(1-\beta b_2)+B\alpha a_2(1-\alpha a_1)+A\alpha\beta b_1 a_2 =$$
$$= A\big(1-\beta b_1-\beta b_2+\beta^2 b_1 b_2+\alpha\beta b_1 a_2\big)+B\big(\alpha a_1-\alpha\beta a_1 b_2+\alpha a_2-\alpha^2 a_1 a_2\big)=$$
$$= A\big(1-\beta b+\beta^2 b_1(b-b_1)+\alpha\beta b_1(a-a_1)\big)+B\big(\alpha a-\alpha\beta a_1(b-b_1)-\alpha^2 a_1(a-a_1)\big)=$$
$$= A\big(1-\beta b+\beta^2 bb_1-\beta^2 b_1^2+\alpha\beta ab_1-\alpha\beta a_1 b_1\big)+B\big(\alpha a-\alpha\beta ba_1+\alpha\beta a_1 b_1-\alpha^2 aa_1+\alpha^2 a_1^2\big)\to\begin{cases}\max\limits_{a_1}\\ \min\limits_{b_1}\end{cases}.$$

Заметим, что

$$\frac{\partial^2 A_2}{\partial a_1^2} = B\alpha^2 > 0 \qquad \text{и} \qquad \frac{\partial^2 A_2}{\partial b_1^2} = -A\beta^2 < 0.$$

Следовательно, для любого фиксированного $b_1\in[0,b]$ функция $A_2(a_1)$ – парабола с ветвями вверх и её наибольшее значение на $[0,a]$ достигается при $a_1=0$ или $a_1=a$. Аналогично для любого фиксированного $a_1\in[0,a]$ функция $A_2(b_1)$ – парабола с ветвями вниз и её наименьшее значение на $[0,b]$ достигается при $b_1=0$ или $b_1=b$.

Таким образом, если существует решение игры в чистых стратегиях, то оно среди четырёх вариантов:

1. $a_1=0, b_1=0 \Rightarrow A_2 = A(1-\beta b)+B\alpha a,$
2. $a_1=0, b_1=b \Rightarrow A_2 = A(1-\beta b)+B\alpha a+A\alpha\beta ab,$
3. $a_1=a, b_1=0 \Rightarrow A_2 = A(1-\beta b)+B\alpha a-B\alpha\beta ab,$
4. $a_1=a, b_1=b \Rightarrow A_2 = A(1-\beta b)+B\alpha a.$

Перебрав эти варианты, находим оптимальные стратегии сторон и соответствующую цену игры:

$$\min_{b_1}\max_{a_1}A_2(a_1,b_1) = \max_{a_1}\min_{b_1}A_2(a_1,b_1) = A(1-\beta b)+B\alpha a \quad \text{при} \quad a_1=0, b_1=0,$$

т.е. оптимальные стратегии сторон состоят во вложении всех средств на втором этапе.

Перейдём к случаю произвольного n и покажем, что результат не изменится и в этом случае.

Теорема 1. Для любого числа этапов предвыборной кампании n оптимальные стратегии сторон состоят во вложении всех средств на последнем этапе, при этом цена игры равна

$$A_n = A - A\beta b + B\alpha a .$$

Доказательство. ► Доказательство проведём в два этапа. Сначала покажем, что при выбранной стратегии Власти Оппозиция не может улучшить свою стратегию (т.е. стратегия Власти оптимальна), а затем наоборот.

1) Пусть $a_1 = a_2 = ... = a_{n-1} = 0, a_n = a$ – стратегия Власти. Покажем, что она оптимальна. В этом случае

$$A_n = A(1-\beta b_1)(1-\beta b_2)...(1-\beta b_{n-1})(1-\beta b_n - \alpha a) + (A+B)\alpha a \to \min_{\{b_i\}},$$

или это эквивалентно

$$A_n^* = (1-\beta b_1)(1-\beta b_2)...(1-\beta b_{n-1})(1-\beta b_n - \alpha a) \to \min_{\{b_i\}}.$$

С учётом того, что $b_n = b - b_1 - ... - b_{n-1}$, A_n^* – функция $n-1$ независимой переменной:

$$A_n^* = (1-\beta b_1)(1-\beta b_2)...(1-\beta b_{n-1})(1-\beta b - \alpha a + \beta b_1 + ... + \beta b_{n-1}).$$

Находим частные производные A_n^* по $b_1, b_2, ..., b_{n-1}$:

$$\frac{\partial A_n^*}{\partial b_1} = (1-\beta b_2)...(1-\beta b_{n-1})(-\beta(1-\beta b - \alpha a + \beta b_1 + ... + \beta b_{n-1}) + \beta(1-\beta b_1)) =$$

$$= \beta(1-\beta b_2)...(1-\beta b_{n-1})(\beta b + \alpha a - 2\beta b_1 - \beta b_2 - ... - \beta b_{n-1}),$$

$$\frac{\partial A_n^*}{\partial b_2} = \beta(1-\beta b_1)(1-\beta b_3)...(1-\beta b_{n-1})(\beta b + \alpha a - 2\beta b_2 - \beta b_1 - \beta b_3 - ... - \beta b_{n-1}),$$

.....

$$\frac{\partial A_n^*}{\partial b_{n-1}} = \beta(1-\beta b_1)...(1-\beta b_{n-2})(\beta b + \alpha a - 2\beta b_{n-1} - \beta b_1 - ... - \beta b_{n-2}).$$

Приравняв все частные производные к нулю, получим систему для нахождения стационарных точек:

$$\begin{cases} \beta(1-\beta b_2)...(1-\beta b_{n-1})(\beta b + \alpha a - 2\beta b_1 - \beta b_2 - ... - \beta b_{n-1}) = 0, \\ \beta(1-\beta b_1)(1-\beta b_3)...(1-\beta b_{n-1})(\beta b + \alpha a - 2\beta b_2 - \beta b_1 - \beta b_3 - ... - \beta b_{n-1}) = 0, \\ ..... \\ \beta(1-\beta b_1)...(1-\beta b_{n-2})(\beta b + \alpha a - 2\beta b_{n-1} - \beta b_1 - ... - \beta b_{n-2}) = 0. \end{cases}$$

Поскольку $\beta \neq 0$ и $0 < \beta b_i < 1$ $(i = 1,2,...,n)$, то получим эквивалентную систему:

$$\begin{cases} 2\beta b_1 + \beta b_2 + \beta b_3 + ... + \beta b_{n-1} = \alpha a + \beta b, \\ 2\beta b_2 + \beta b_1 + \beta b_3 + ... + \beta b_{n-1} = \alpha a + \beta b, \\ ..... \\ 2\beta b_{n-1} + \beta b_1 + \beta b_2 + ... + \beta b_{n-2} = \alpha a + \beta b. \end{cases}$$

Сравнивая попарно уравнения системы, находим её решение:

$$b_1 = b_2 = ... = b_{n-1} = \frac{\alpha a + \beta b}{\beta n}.$$

Тогда

$$b_n = b - \frac{(n-1)(\alpha a + \beta b)}{\beta n} = \frac{\alpha a + \beta b - \alpha a n}{\beta n}.$$

Если найденные b_i $(i = 1,2,...,n)$ принадлежат области допустимых значений, то значение функции в этом случае равно

$$A_n^* = \left(1 - \beta \cdot \frac{\alpha a + \beta b}{\beta n}\right)^{n-1}\left(1 - \alpha a - \beta \cdot \frac{\alpha a + \beta b - \alpha a n}{\beta n}\right) = \left(1 - \frac{\alpha a + \beta b}{n}\right)^n.$$

Исследуем функцию A_n^* на границе области, т.е. когда одна из переменных $b_1, b_2, ..., b_{n-1}, b_n$ равна нулю.

а) Так как A_n^* симметрична относительно $b_1, b_2, ..., b_{n-1}$, то пусть для определённости $b_1 = 0$, тогда задача сводится к исследованию функции вида A_n^*, но уже с $n-2$ независимыми переменными.

б) Если $b_n = 0$, то

$$A_n^* = (1-\alpha a)(1-\beta b_1)...(1-\beta b_{n-1}) = (1-\alpha a)(1-\beta b_1)...(1-\beta b_{n-2})(1-\beta b + \beta b_1 + ... + \beta b_{n-2}).$$

Находим частные производные A_n^* по $b_1, b_2, ..., b_{n-2}$:

$$\frac{\partial A_n^*}{\partial b_1} = (1-\alpha a)(1-\beta b_2)...(1-\beta b_{n-2})(-\beta(1-\beta b + \beta b_1 + ... + \beta b_{n-2}) + \beta(1-\beta b_1)) =$$

$$= \beta(1-\alpha a)(1-\beta b_2)...(1-\beta b_{n-2})(\beta b - 2\beta b_1 - \beta b_2 - ... - \beta b_{n-2}),$$

.....

$$\frac{\partial A_n^*}{\partial b_{n-2}} = \beta(1-\alpha a)(1-\beta b_1)...(1-\beta b_{n-3})(\beta b - 2\beta b_{n-2} - \beta b_1 - ... - \beta b_{n-3}),$$

и, приравняв их к нулю, получим систему для нахождения стационарных точек:

$$\begin{cases} 2b_1 + b_2 + ... + b_{n-2} = b, \\ 2b_2 + b_1 + ... + b_{n-2} = b, \\ ..... \\ 2b_{n-2} + b_1 + ... + b_{n-3} = b. \end{cases}$$

Решая систему, находим

$$b_1 = b_2 = ... = b_{n-2} = \frac{b}{n-1},$$

следовательно,

$$b_{n-1} = \frac{b}{n-1} \qquad \text{и} \qquad A_n^* = (1-\alpha a)\left(1 - \frac{\beta b}{n-1}\right)^{n-1}.$$

Исследование функции A_n^* на границе, т.е. когда $b_n = 0$ и одно из b_i $(i = 1,2,...,n-1)$ равно нулю, сводится к исследованию функции такого же вида, но с $n-3$ независимыми переменными. Таким образом, при $b_n = 0$ наименьшее значение функции равно

$$\min\left\{(1-\alpha a)\left(1-\frac{\beta b}{n-1}\right)^{n-1}; (1-\alpha a)\left(1-\frac{\beta b}{n-2}\right)^{n-2}; ...; (1-\alpha a)\left(1-\frac{\beta b}{2}\right)^{2}; (1-\alpha a)\left(1-\frac{\beta b}{1}\right)^{1}\right\} =$$

$$= \min_{i=1..n-1}\left\{(1-\alpha a)\left(1-\frac{\beta b}{n-i}\right)^{n-i}\right\}.$$

Покажем, что функция $y(n) = \left(1 - \frac{\beta b}{n-1}\right)^{n-1}$ неубывающая:

$$y_n' = \left(\left(1-\frac{\beta b}{n-1}\right)^{n-1}\right)' = \left(1-\frac{\beta b}{n-1}\right)^{n-1}\left(\ln\left(1-\frac{\beta b}{n-1}\right) + \frac{\beta b}{n-1-\beta b}\right).$$

Так как $\left(1-\frac{\beta b}{n-1}\right)^{n-1}>0$, то достаточно показать, что $\left(\ln\left(1-\frac{\beta b}{n-1}\right)+\frac{\beta b}{n-1-\beta b}\right)\geq 0$.

По формуле разложения в степенной ряд

$$\ln\left(1-\frac{\beta b}{n-1}\right)=-\frac{\beta b}{n-1}-\frac{1}{2}\left(\frac{\beta b}{n-1}\right)^2-\frac{1}{3}\left(\frac{\beta b}{n-1}\right)^3-\ldots,$$

следовательно,

$$\frac{\beta b}{n-1-\beta b}+\ln\left(1-\frac{\beta b}{n-1}\right)=\frac{\beta b}{n-1-\beta b}-\frac{\beta b}{n-1}-\frac{1}{2}\left(\frac{\beta b}{n-1}\right)^2-\frac{1}{3}\left(\frac{\beta b}{n-1}\right)^3-\ldots>$$

$$>\frac{\beta b}{n-1-\beta b}-\frac{\beta b}{n-1}-\left(\frac{\beta b}{n-1}\right)^2-\left(\frac{\beta b}{n-1}\right)^3-\ldots=\frac{\beta b(n-1)-\beta b(n-1-\beta b)}{(n-1-\beta b)(n-1)}-\left(\frac{\beta b}{n-1}\right)^2-\ldots=$$

$$=\frac{\beta^2 b^2}{(n-1-\beta b)(n-1)}-\frac{\beta^2 b^2}{(n-1)^2}-\left(\frac{\beta b}{n-1}\right)^3-\ldots=\frac{\beta^2 b^2(n-1)-\beta^2 b^2(n-1-\beta b)}{(n-1-\beta b)(n-1)^2}-\left(\frac{\beta b}{n-1}\right)^3-\ldots=$$

$$=\frac{\beta^3 b^3}{(n-1-\beta b)(n-1)^2}-\left(\frac{\beta b}{n-1}\right)^3-\ldots\geq 0,$$

так как любая частная сумма неотрицательна.

Таким образом, при $b_n=0$ наименьшее значение A_n^* равно $(1-\alpha a)(1-\beta b)$.

После нескольких шагов пункт а) сведётся к нахождению наименьшего значения функции одной независимой переменной (т.е. случаю $n=2$). Как было показано ранее, в этом случае стороны имеют оптимальные чистые стратегии и $A_n^*=1-\alpha a-\beta b$, что меньше $(1-\alpha a)(1-\beta b)$ и всех остальных значений в стационарных точках. Это наименьшее значение A_n^* достигается при $b_1=b_2=\ldots=b_{n-1}=0, b_n=b$, а соответствующее наименьшее значение A_n равно

$$A_n=A(1-\alpha a-\beta b)+(A+B)\alpha a=A-A\beta b+B\alpha a.$$

Таким образом, при выбранной стратегии Власти Оппозиция не может уменьшить значение A_n, следовательно, стратегия Власти $a_1=a_2=\ldots=a_{n-1}=0, a_n=a$ оптимальна.

2) Пусть $b_1=b_2=\ldots=b_{n-1}=0, b_n=b$ – стратегия Оппозиции. Покажем, что она оптимальна. В этом случае

$$A_n=A(1-\beta b-\alpha a_n)\prod_{i=1}^{n-1}(1-\alpha a_i)+(A+B)\alpha\left[a_1(1-\alpha a_2)\ldots(1-\alpha a_{n-1})(1-\beta b-\alpha a_n)+\right.$$
$$\left.+a_2(1-\alpha a_3)\ldots(1-\alpha a_{n-1})(1-\beta b-\alpha a_n)+\ldots+a_{n-1}(1-\beta b-\alpha a_n)+a_n\right]\to\max_{\{a_i\}}.$$

Поскольку $a_n=a-a_1-\ldots-a_{n-1}$, то

$$A_n=\left[1-\beta b-\alpha a+\alpha a_1+\ldots+\alpha a_{n-1}\right]\cdot\left[A(1-\alpha a_1)(1-\alpha a_2)\ldots(1-\alpha a_{n-1})+\right.$$
$$+(A+B)\alpha\left[a_1(1-\alpha a_2)\ldots(1-\alpha a_{n-1})+a_2(1-\alpha a_3)\ldots(1-\alpha a_{n-1})+\ldots+a_{n-2}(1-\alpha a_{n-1})+a_{n-1}\right]+$$
$$\left.+(A+B)\alpha(a-a_1-\ldots-a_{n-1})\right.$$

Для нахождения стационарных точек A_n находим её частные производные и приравниваем их к нулю:

$$\frac{\partial A_n}{\partial a_1}=\alpha\left[A(1-\alpha a_1)(1-\alpha a_2)\ldots(1-\alpha a_{n-1})+(A+B)\alpha\left[a_1(1-\alpha a_2)\ldots(1-\alpha a_{n-1})+\right.\right.$$
$$\left.+a_2(1-\alpha a_3)\ldots(1-\alpha a_{n-1})+\ldots+a_{n-2}(1-\alpha a_{n-1})+a_{n-1}\right]+\left[1-\beta b-\alpha a+\alpha a_1+\ldots+\alpha a_{n-1}\right]\times$$
$$\left.\times\left[-A\alpha(1-\alpha a_2)\ldots(1-\alpha a_{n-1})+(A+B)\alpha\left[(1-\alpha a_2)\ldots(1-\alpha a_{n-1})\right]\right]-(A+B)\alpha=0;\right.$$

$$\frac{\partial A_n}{\partial a_2} = \alpha\left[A(1-\alpha a_1)(1-\alpha a_2)...(1-\alpha a_{n-1}) + (A+B)\alpha\left[a_1(1-\alpha a_2)...(1-\alpha a_{n-1}) + \right.\right.$$
$$\left.\left. + a_2(1-\alpha a_3)...(1-\alpha a_{n-1}) + ... + a_{n-2}(1-\alpha a_{n-1}) + a_{n-1}\right]\right] + \left[1 - \beta b - \alpha a + \alpha a_1 + ... + \alpha a_{n-1}\right] \times$$
$$\times\left[-A\alpha(1-\alpha a_1)(1-\alpha a_3)...(1-\alpha a_{n-1}) + (A+B)\alpha\left[-\alpha a_1(1-\alpha a_3)...(1-\alpha a_{n-1}) + \right.\right.$$
$$\left.\left. + (1-\alpha a_3)...(1-\alpha a_{n-1})\right]\right] - (A+B)\alpha = 0;$$

$$\frac{\partial A_n}{\partial a_3} = \alpha\left[A(1-\alpha a_1)(1-\alpha a_2)...(1-\alpha a_{n-1}) + (A+B)\alpha\left[a_1(1-\alpha a_2)...(1-\alpha a_{n-1}) + \right.\right.$$
$$\left.\left. + a_2(1-\alpha a_3)...(1-\alpha a_{n-1}) + ... + a_{n-2}(1-\alpha a_{n-1}) + a_{n-1}\right]\right] + \left[1 - \beta b - \alpha a + \alpha a_1 + ... + \alpha a_{n-1}\right] \times$$
$$\times\left[-A\alpha(1-\alpha a_1)(1-\alpha a_2)(1-\alpha a_4)...(1-\alpha a_{n-1}) + (A+B)\alpha\left[-\alpha a_1(1-\alpha a_2)(1-\alpha a_4)\times...\right.\right.$$
$$\left.\left. ...\times(1-\alpha a_{n-1}) - \alpha a_2(1-\alpha a_4)...(1-\alpha a_{n-1}) + (1-\alpha a_4)...(1-\alpha a_{n-1})\right]\right] - (A+B)\alpha = 0;$$

.....

Сравниваем выражения для $\frac{\partial A_n}{\partial a_1}$ и $\frac{\partial A_n}{\partial a_2}$:

$$-A\alpha(1-\alpha a_2)...(1-\alpha a_{n-1}) + (A+B)\alpha\left[(1-\alpha a_2)...(1-\alpha a_{n-1})\right] =$$
$$= -A\alpha(1-\alpha a_1)(1-\alpha a_3)...(1-\alpha a_{n-1}) + (A+B)\alpha\left[-\alpha a_1(1-\alpha a_3)...(1-\alpha a_{n-1}) + \right.$$
$$\left. + (1-\alpha a_3)...(1-\alpha a_{n-1})\right] \Leftrightarrow$$
$$\Leftrightarrow \left[1-\alpha a_2\right]\cdot\left[-A\alpha(1-\alpha a_3)...(1-\alpha a_{n-1}) + (A+B)\alpha(1-\alpha a_3)...(1-\alpha a_{n-1})\right] =$$
$$= \left[1-\alpha a_1\right]\cdot\left[-A\alpha(1-\alpha a_3)...(1-\alpha a_{n-1}) + (A+B)\alpha(1-\alpha a_3)...(1-\alpha a_{n-1})\right] \Rightarrow$$
$$\Rightarrow a_1 = a_2.$$

Аналогично сравниваем выражения для $\frac{\partial A_n}{\partial a_1}$ и $\frac{\partial A_n}{\partial a_3}$:

$$-A\alpha(1-\alpha a_2)...(1-\alpha a_{n-1}) + (A+B)\alpha\left[(1-\alpha a_2)...(1-\alpha a_{n-1})\right] =$$
$$= -A\alpha(1-\alpha a_1)(1-\alpha a_2)(1-\alpha a_4)...(1-\alpha a_{n-1}) + (A+B)\alpha\left[-\alpha a_1(1-\alpha a_2)(1-\alpha a_4)\times...\right.$$
$$\left. ...\times(1-\alpha a_{n-1}) - \alpha a_2(1-\alpha a_4)...(1-\alpha a_{n-1}) + (1-\alpha a_4)...(1-\alpha a_{n-1})\right] \Leftrightarrow$$
$$\Leftrightarrow \left[1-\alpha a_3\right]\cdot\left[-A\alpha(1-\alpha a_2)(1-\alpha a_4)...(1-\alpha a_{n-1}) + (A+B)\alpha(1-\alpha a_2)(1-\alpha a_4)...(1-\alpha a_{n-1})\right] =$$
$$= \left[1-\alpha a_1\right]\cdot\left[-A\alpha(1-\alpha a_2)(1-\alpha a_4)...(1-\alpha a_{n-1}) + (A+B)\alpha(1-\alpha a_2)(1-\alpha a_4)...(1-\alpha a_{n-1})\right] \Rightarrow$$
$$\Rightarrow a_1 = a_3.$$

.....

Наконец, сравниваем выражения для $\frac{\partial A_n}{\partial a_1}$ и $\frac{\partial A_n}{\partial a_{n-1}}$:

$$-A\alpha(1-\alpha a_2)...(1-\alpha a_{n-1}) + (A+B)\alpha\left[(1-\alpha a_2)...(1-\alpha a_{n-1})\right] =$$
$$= -A\alpha(1-\alpha a_1)...(1-\alpha a_{n-2}) + (A+B)\alpha\left[-\alpha a_1(1-\alpha a_2)...(1-\alpha a_{n-2}) - \right.$$
$$\left. - \alpha a_2(1-\alpha a_3)...(1-\alpha a_{n-2}) - ... - \alpha a_{n-2} + 1\right] \Leftrightarrow$$
$$-A\alpha(1-\alpha a_2)...(1-\alpha a_{n-1}) + (A+B)\alpha\left[(1-\alpha a_2)...(1-\alpha a_{n-1})\right] =$$
$$= -A\alpha(1-\alpha a_1)...(1-\alpha a_{n-2}) + (A+B)\alpha\left[(1-\alpha a_1)...(1-\alpha a_{n-2})\right] \Rightarrow$$
$$\Rightarrow a_1 = a_{n-1}.$$

Следовательно, $a_1 = a_2 = ... = a_{n-1}$. Заменим в выражении для $\frac{\partial A_n}{\partial a_1}$ все a_i $(i = 2,...,n-1)$ на a_1:

$$\frac{\partial A_n}{\partial a_1} = \alpha\left[A(1-\alpha a_1)^{n-1} + (A+B)\alpha\left[a_1(1-\alpha a_1)^{n-2} + a_1(1-\alpha a_1)^{n-3} + \ldots + a_1\right]\right] +$$

$$+\left[1-\beta b-\alpha a+\alpha a_1(n-1)\right]\cdot\left[-A\alpha(1-\alpha a_1)^{n-2} + (A+B)\alpha(1-\alpha a_1)^{n-2}\right] = 0 \Rightarrow$$

$$\alpha A(1-\alpha a_1)^{n-1} + (A+B)\frac{\alpha a_1\left((1-\alpha a_1)^{n-1}-1\right)}{-\alpha a_1} + \left[1-\beta b-\alpha a+\alpha a_1(n-1)\right]B\alpha(1-\alpha a_1)^{n-2} = 0 \Rightarrow$$

$$\alpha A(1-\alpha a_1)^{n-1} + (A+B)\left(1-(1-\alpha a_1)^{n-1}\right) + \left[1-\beta b-\alpha a+\alpha a_1(n-1)\right]B\alpha(1-\alpha a_1)^{n-2} = 0.$$

Поскольку все слагаемые в левой части равенства положительны, то вся левая часть тоже положительна и уравнение действительных корней не имеет. Следовательно, внутри области допустимых значений нет стационарных точек, а наибольшее значение функции A_n находится на границе области, т.е. когда одна из переменных a_i $(i = 1,2,\ldots,n)$ равна нулю. Заметим, что какую бы из переменных a_i $(i = 1,2,\ldots,n-1)$ мы не положили равной нулю, к исследованию сводится функция вида A_n, но уже с $n-2$ независимыми переменными и т.д. В итоге снова приходим к случаю $n = 2$. Если положить изначальна $a_n = 0$, то задача тоже сводится к исследованию A_n с $n-2$ независимыми переменными. Таким образом, наибольшее значение A_n достигается при

$$a_1 = a_2 = \ldots = a_{n-1} = 0, a_n = a$$

и равно $A - A\beta b + B\alpha a$.

Так как при выбранной стратегии Оппозиции Власть не может увеличить значение A_n, то стратегия Оппозиции $b_1 = b_2 = \ldots = b_{n-1} = 0, b_n = b$ оптимальна и теорема доказана.◀

2.3. Нахождение оптимальных стратегий сторон с учётом действия рекламы на предыдущих этапах. Все обозначения, введенные ранее, остаются в силе. Кроме того, будем считать, что эффективность рекламы на каком-либо этапе зависит ещё и от количества средств, вложенных на предыдущих этапах, т.е. чем больше средств вложено на предыдущих этапах, тем эффективнее реклама на данном этапе. Пусть γ – коэффициент «последействия» рекламы, показывающий насколько возрастает эффективность рекламы, если вкладывать средства на предыдущих этапах; ν – коэффициент дисконтирования рекламы во времени, т.е. показатель того, как снижается эффект от рекламы с течением времени.

В этом случае выражения для A_1 и B_1 не изменяются:

$$A_1 = A - A\beta b_1 + B\alpha a_1 = A(1-\beta b_1) + B\alpha a_1,$$
$$B_1 = B - B\alpha a_1 + A\beta b_1 = B(1-\alpha a_1) + A\beta b_1.$$

Выведем общую формулу для A_n:

$$A_2 = A_1(1-(\beta+\gamma b_1)b_2) + B_1 a_2(\alpha+\gamma a_1) = A_1(1-(\beta+\gamma b_1)b_2) + (A+B-A_1)a_2(\alpha+\gamma a_1) =$$
$$= A_1(1-(\beta+\gamma b_1)b_2 - (\alpha+\gamma a_1)a_2) + (A+B)a_2(\alpha+\gamma a_1) =$$
$$= A(1-\beta b_1-\alpha a_1)(1-(\beta+\gamma b_1)b_2 - (\alpha+\gamma a_1)a_2) + (A+B)\alpha a_1(1-(\beta+\gamma b_1)b_2 - (\alpha+\gamma a_1)a_2) =$$
$$= (A+B)a_2(\alpha+\gamma a_1);$$
$$A_3 = A_2(1-(\beta+\gamma b_2+\gamma\nu b_1)b_3 - (\alpha+\gamma a_2+\gamma\nu a_1)a_3) + (A+B)a_3(\alpha+\gamma a_2+\gamma\nu a_1) =$$
$$= A(1-\beta b_1-\alpha a_1)(1-(\beta+\gamma b_1)b_2 - (\alpha+\gamma a_1)a_2)(1-(\beta+\gamma b_2+\gamma\nu b_1)b_3 - (\alpha+\gamma a_2+\gamma\nu a_1)a_3) +$$
$$+ (A+B)\alpha a_1(1-(\beta+\gamma b_1)b_2 - (\alpha+\gamma a_1)a_2)(1-(\beta+\gamma b_2+\gamma\nu b_1)b_3 - (\alpha+\gamma a_2+\gamma\nu a_1)a_3) +$$
$$+ (A+B)a_2(\alpha+\gamma a_1)(1-(\beta+\gamma b_2+\gamma\nu b_1)b_3 - (\alpha+\gamma a_2+\gamma\nu a_1)a_3) + (A+B)a_3(\alpha+\gamma a_2+\gamma\nu a_1);$$

.....

$$A_n = A\prod_{i=1}^{n}\left(1-\left(\beta+\gamma b_{i-1}+\gamma\nu b_{i-2}+\ldots+\gamma\nu^{i-2}b_1\right)b_i-\left(\alpha+\gamma a_{i-1}+\gamma\nu a_{i-2}+\ldots+\gamma\nu^{i-2}a_1\right)a_i\right)+$$

$$+(A+B)\sum_{k=1}^{n-1}a_k\left(\alpha+\gamma a_{k-1}+\gamma\nu a_{k-2}+\ldots+\gamma\nu^{k-2}a_1\right)\times$$

$$\times\prod_{j=k+1}^{n}\left(1-\left(\beta+\gamma b_{j-1}+\gamma\nu b_{j-2}+\ldots+\gamma\nu^{j-2}b_1\right)b_j-\left(\alpha+\gamma a_{j-1}+\gamma\nu a_{j-2}+\ldots+\gamma\nu^{j-2}a_1\right)a_j\right)+$$

$$+(A+B)a_n\left(\alpha+\gamma a_{n-1}+\gamma\nu a_{n-2}+\ldots+\gamma\nu^{n-2}a_1\right).$$

Рассмотрим частный случай $n=2$ с учётом того, что $a_2=a-a_1$ и $b_2=b-b_1$. В этом случае число сторонников Власти равно

$$A_2 = A_1\left(1-(\beta+\gamma b_1)b_2\right)+B_1a_2(\alpha+\gamma a_1)=$$

$$=\left(A(1-\beta b_1)+B\alpha a_1\right)\left(1-(\beta+\gamma b_1)b_2\right)+\left(B(1-\alpha a_1)+A\beta b_1\right)a_2(\alpha+\gamma a_1)=$$

$$=A-A\beta b_2-A\gamma b_1b_2-A\beta b_1+A\beta\left(^2\right)b_1b_2+A\beta\gamma b_1^2b_2+B\alpha a_1-B\alpha\beta a_1b_2-B\alpha\gamma a_1b_1b_2+$$

$$+B\alpha a_2+B\gamma a_1a_2-B\alpha^2a_1a_2-B\alpha\gamma a_1^2a_2+A\alpha\beta a_2b_1+A\beta\gamma a_1a_2b_1=A-A\beta b+A\beta b_1-$$

$$-A\gamma bb_1+A\gamma b_1^2-A\beta b_1+A\beta^2bb_1-A\beta^2b_1^2+A\beta\gamma bb_1^2-A\beta\gamma b_1^3+B\alpha a_1-B\alpha\beta ba_1+$$

$$+B\alpha\beta a_1b_1-B\alpha\gamma a_1b_1b+B\alpha\gamma a_1b_1^2+B\alpha a-B\alpha a_1+B\gamma aa_1-B\gamma a_1^2-B\alpha^2aa_1+B\alpha^2a_1^2-$$

$$-B\alpha\gamma aa_1^2+B\alpha\gamma a_1^3+A\alpha\beta ab_1-A\alpha\beta a_1b_1+A\beta\gamma aa_1b_1-A\beta\gamma a_1^2b_1=-A\beta\gamma b_1^3+b_1^2\left[B\alpha\gamma a_1+A\gamma-\right.$$

$$\left.-A\beta^2+A\beta\gamma b\right]+b_1\left[-A\beta\gamma a_1^2+a_1(B\alpha\beta-B\alpha\gamma b-A\alpha\beta+A\beta\gamma a)+\left(-A\gamma b+A\beta^2b+A\alpha\beta a\right)\right]$$

$$+\left[B\alpha\gamma a_1^3+a_1^2\left(B\alpha^2-B\gamma-B\alpha\gamma a\right)+a_1\left(-B\alpha\beta b+B\gamma a-B\alpha^2a\right)+\left(A-A\beta b+B\alpha a\right)\right].$$

После преобразований видно, что игра является сепарабельной. Поскольку $A_2(a_1,b_1)$ непрерывна на $[0,a]\times[0,b]$, то игра имеет решение в смешанных стратегиях [3]. Введём обозначения:

$$r_1(a_1)=a_1,\quad r_2(a_1)=a_1^2,\quad r_3(a_1)=a_1^3;$$

$$s_1(b_1)=b_1,\quad s_2(b_1)=b_1^2,\quad s_3(b_1)=b_1^3.$$

Пусть $F(a_1)$ и $G(b_1)$ – функции распределения стратегий Власти и Оппозиции соответственно, тогда обозначим

$$u_1=\int_0^a r_1(a_1)dF(a_1)=\int_0^a a_1dF(a_1),\qquad w_1=\int_0^b s_1(b_1)dG(b_1)=\int_0^b b_1dG(b_1),$$

$$u_2=\int_0^a r_2(a_1)dF(a_1)=\int_0^a a_1^2dF(a_1),\qquad w_2=\int_0^b s_2(b_1)dG(b_1)=\int_0^b b_1^2dG(b_1),$$

$$u_3=\int_0^a r_3(a_1)dF(a_1)=\int_0^a a_1^3dF(a_1),\qquad w_3=\int_0^b s_3(b_1)dG(b_1)=\int_0^b b_1^3dG(b_1).$$

Таким образом, получаем две точки $u=(u_1,u_2,u_3)$ и $w=(w_1,w_2,w_3)$ и находим средний выигрыш:

$$A_2(u,w)=-A\beta\gamma w_3+w_2\left[B\alpha\gamma u_1+\left(A\gamma-A\beta^2+A\beta\gamma b\right)\right]+$$

$$+w_1\left[-A\beta\gamma u_2+u_1(B\alpha\beta-B\alpha\gamma b-A\alpha\beta+A\beta\gamma a)+\left(A\beta^2b-A\gamma b+A\alpha\beta a\right)\right]+$$

$$+\left[B\alpha\gamma u_3+u_2\left(B\alpha^2-B\gamma-B\alpha\gamma a\right)+u_1\left(B\gamma a-B\alpha\beta b-B\alpha^2a\right)+\left(A-A\beta b+B\alpha a\right)\right],$$

или

$$A_2(u,w) = B\alpha\gamma u_3 + u_2\left[-A\beta\gamma w_1 + \left(B\alpha^2 - B\gamma - B\alpha\gamma a\right)\right] +$$
$$+ u_1\left[B\alpha\gamma w_2 + w_1\left(B\alpha\beta - B\alpha\gamma b - A\alpha\beta + A\beta\gamma a\right) + \left(B\gamma a - B\alpha\beta b - B\alpha^2 a\right)\right] +$$
$$+ \left[-A\beta\gamma w_3 + w_2\left(A\gamma - A\beta^2 + A\beta\gamma b\right) + w_1\left(A\beta^2 b - A\gamma b + A\alpha\beta a\right) + \left(A - A\beta b + B\alpha a\right)\right].$$

Уравнения $r_1(a_1) = a_1$, $r_2(a_1) = a_1^2$, $r_3(a_1) = a_1^3$ $(a_1 \in [0,a])$ задают параметрически кривую в трёхмерном пространстве. Обозначим её выпуклую оболочку через U. Аналогично уравнения $s_1(b_1) = b_1$, $s_2(b_1) = b_1^2$, $s_3(b_1) = b_1^3$ $(b_1 \in [0,b])$ задают параметрически кривую, выпуклую оболочку которой обозначим через W.

Из первого представления $A_2(u,w)$ выпишем функции при w_3, w_2, w_1:

$$f_3(u) = -A\beta\gamma,$$
$$f_2(u) = B\alpha\gamma u_1 + \left(A\gamma - A\beta^2 + A\beta\gamma b\right),$$
$$f_1(u) = -A\beta\gamma u_2 + u_1\left(B\alpha\beta - B\alpha\gamma b - A\alpha\beta + A\beta\gamma a\right) + \left(A\beta^2 b - A\gamma b + A\alpha\beta a\right).$$

Из второго представления $A_2(u,w)$ выпишем функции при u_3, u_2, u_1:

$$g_3(w) = B\alpha\gamma,$$
$$g_2(w) = -A\beta\gamma w_1 + \left(B\alpha^2 - B\gamma - B\alpha\gamma a\right),$$
$$g_1(w) = B\alpha\gamma w_2 + w_1\left(B\alpha\beta - B\alpha\gamma b - A\alpha\beta + A\beta\gamma a\right) + \left(B\gamma a - B\alpha\beta b - B\alpha^2 a\right).$$

Приравнивая к нулю полученные функции (где это возможно), получим уравнения плоскостей:

$B\alpha\gamma u_1 + \left(A\gamma - A\beta^2 + A\beta\gamma b\right) = 0$ – плоскость l_2 в области U,

$-A\beta\gamma u_2 + u_1\left(B\alpha\beta - B\alpha\gamma b - A\alpha\beta + A\beta\gamma a\right) + \left(A\beta^2 b - A\gamma b + A\alpha\beta a\right) = 0$ – плоскость l_1 в области U,

$-A\beta\gamma w_1 + \left(B\alpha^2 - B\gamma - B\alpha\gamma a\right) = 0$ – плоскость m_2 в области W,

$B\alpha\gamma w_2 + w_1\left(B\alpha\beta - B\alpha\gamma b - A\alpha\beta + A\beta\gamma a\right) + \left(B\gamma a - B\alpha\beta b - B\alpha^2 a\right) = 0$ – плоскость m_1 в области W.

В зависимости от значений параметров плоскости l_1 и l_2 делят область U (а m_1 и m_2 – область W) на несколько частей: $U_1, U_2, ..., U_c$ ($W_1, W_2, ..., W_d$). К каждой из частей U_i $(i = 1,...,c)$ применяем отображение на W: пусть u – любая точка U_i, тогда её образ $W(u)$ – множество точек $w \in W$, для которых $A_2(u,w) = \min\limits_{b_1 \in [0,b]} A_2(u,b_1)$. Аналогично к каждой из частей W_j $(j = 1,...,d)$ применяем отображение на U: пусть w – любая точка W_j, тогда её образ $U(w)$ – множество точек $u \in U$, для которых $A_2(u,w) = \max\limits_{a_1 \in [0,a]} A_2(a_1,w)$. Если для двух точек $u \in U_i$ и $w \in W_j$ окажется, что $w \in W_j(u)$, а $u \in U_i(w)$, то u – неподвижная точка U_i, а w – неподвижная точка W_j. Таким образом, находим все неподвижные точки $u = (u_1, u_2, u_3)$ и $w = (w_1, w_2, w_3)$ с соответствующей ценой игры.

Поскольку число функций $r_1(a_1), r_2(a_1), r_3(a_1)$ равно трём и число функций $s_1(b_1), s_2(b_1), s_3(b_1)$ также равно трём, то функции распределения состоят из трёх одноступенчатых функций:

$$F(a_1) = p_1 I_{x_1}(a_1) + p_2 I_{x_2}(a_1) + (1 - p_1 - p_2) I_{x_3}(a_1),$$
$$G(b_1) = q_1 I_{y_1}(b_1) + q_2 I_{y_2}(b_1) + (1 - q_1 - q_2) I_{y_3}(b_1).$$

Значения p_1 и p_2 находим из системы, записанной в векторной форме:

$$\vec{u} = p_1 \overrightarrow{u^1} + p_2 \overrightarrow{u^2} + (1 - p_1 - p_2) \overrightarrow{u^3},$$

где u^1, u^2, u^3 – крайние точки области U; $(x_1, x_2, x_3) = (u_1^1, u_1^2, u_1^3)$.

Аналогично значения q_1 и q_2 находим из системы, записанной в векторной форме:

$$\vec{w} = q_1 \overrightarrow{w^1} + q_2 \overrightarrow{w^2} + (1 - q_1 - q_2)\overrightarrow{w^3},$$

где w^1, w^2, w^3 – крайние точки области W; $(y_1, y_2, y_3) = (w_1^1, w_1^2, w_1^3)$.

Таким образом, приходим к следующему утверждению.

Утверждение 2. В случае двухэтапной предвыборной кампании каждая из сторон имеет оптимальные смешанные стратегии со ступенчатой функцией распределения, состоящей не более чем из трёх ступеней.

Рассмотрим *некоторые достаточные условия существования оптимальных чистых стратегий сторон.*

1) Если

$$\frac{\partial^2 A_2}{\partial a_1^2} = -2B\gamma + 2B\alpha^2 - 2B\alpha\gamma a + 6B\alpha\gamma a_1 - 2A\beta\gamma b_1 < 0 \quad \forall a_1 \in [0,a] \text{ и } \forall b_1 \in [0,b],$$

что эквивалентно выполнению неравенства при $a_1 = a, b_1 = 0$, т.е.

$$\alpha^2 - \gamma + 2\alpha\gamma a < 0.$$

то Власть имеет оптимальную чистую стратегию. Цена игры определяется по формуле

$$v = \max_{a_1} \min_{b_1} A_2(a_1, b_1),$$

а оптимальная чистая стратегия a_1^0 Власти определяется из уравнения

$$\min_{b_1} A_2(a_1^0, b_1) = v.$$

2) Если

$$\frac{\partial^2 A_2}{\partial b_1^2} = 2A\gamma - 2A\beta^2 + 2A\beta\gamma b - 6A\beta\gamma b_1 + 2B\alpha\gamma a_1 > 0 \quad \forall a_1 \in [0,a] \text{ и } \forall b_1 \in [0,b],$$

что эквивалентно выполнению неравенства при $a_1 = 0, b_1 = b$, т.е.

$$\beta^2 - \gamma + 2\beta\gamma b < 0,$$

то Оппозиция имеет оптимальную чистую стратегию. Цена игры определяется по формуле

$$v = \min_{b_1} \max_{a_1} A_2(a_1, b_1),$$

а оптимальная чистая стратегия b_1^0 Оппозиции определяется из уравнения

$$\max_{a_1} A_2(a_1, b_1^0) = v.$$

3) Если выполнено одновременно

$$\alpha^2 - \gamma + 2\alpha\gamma a < 0 \quad \text{и} \quad \beta^2 - \gamma + 2\beta\gamma b < 0,$$

то обе стороны имеют оптимальные чистые стратегии.

Таким образом, одновременно указывается способ нахождения оптимальных стратегий сторон, вообще говоря, смешанных, так как достаточные условия не всегда выполнены. На самом деле, имеет место более сильный результат, хотя и без указания способа нахождения оптимальных стратегий.

Теорема 2. *В случае двухэтапной предвыборной кампании каждая из сторон имеет оптимальные чистые стратегии.*

Доказательство. ► Функция $A_2(a_1, b_1)$ определена и непрерывна на прямоугольнике $[0,a] \times [0,b]$.

Для каждого $a_1 \in [0,a]$ определим функцию $A_2^{\min}(a_1) = \min_{b_1 \in [0,b]} A_2(a_1, b_1)$.

Для каждого $b_1 \in [0,b]$ определим функцию $A_2^{\max}(b_1) = \max_{a_1 \in [0,a]} A_2(a_1, b_1)$.

В силу непрерывности $A_2(a_1, b_1)$ на прямоугольнике для существования чистых стратегий сторон достаточно доказать, что

1) для каждого $a_1 \in [0,a]$ (за исключением может быть $a_1^* = 0$) существует единственное значение $b_1 \in [0,b]$ такое, что выполнено $A_2^{\min}(a_1) = \min\limits_{b_1 \in [0,b]} A_2(a_1,b_1)$;

2) для каждого $b_1 \in [0,b]$ (за исключением может быть $b_1^* = 0$) существует единственное значение $a_1 \in [0,a]$ такое, что выполнено $A_2^{\max}(b_1) = \max\limits_{a_1 \in [0,a]} A_2(a_1,b_1)$.

Тогда точка пересечения кривых $A_2^{\min}(a_1)$ и $A_2^{\max}(b_1)$ на поверхности $A_2(a_1,b_1)$ всегда существует (поскольку кривые в этом случае тоже непрерывны, а их концы лежат на сторонах прямоугольника $[0,a]\times[0,b]$) и соответствует оптимальным стратегиям сторон.

Возьмём любое фиксированное $a_1^* \in [0,a]$. Для него выполнено неравенство $A_2(a_1^*,0) \le A_2(a_1^*,b)$, поскольку коэффициенты эффективности для Оппозиции одинаковы и равны β в обоих случаях, а число сторонников Власти ко второму этапу может только увеличиться, если Оппозиция не вкладывает средства. Причём точное равенство достигается только при $a_1^* = 0$.

Рассмотрим случай $a_1^* \neq 0$. Так как a_1^* зафиксировано, то функция $A_2(a_1^*,b_1)$ одного аргумента b_1 представляет собой кубическую параболу. Предположим, что существуют две точки на отрезке $[0,b]$, в которых функция $A_2(a_1^*,b_1)$ принимает одинаковые значения и эти значения являются наименьшими на отрезке $[0,b]$. В этих точках производная функции $A_2(a_1^*,b_1)$ не может обращаться в нуль одновременно, поскольку тогда между этими точками существует ещё одна критическая точка (для локального максимума), а кубическая парабола имеет не более двух критических точек. Следовательно, одна из этих точек - $b_1 = 0$, а вторая – критическая точка кубической параболы. Так как в $A_2(a_1^*,b_1)$ коэффициент при b_1 меньше нуля, то $\lim\limits_{b_1 \to -\infty} A_2(a_1^*,b_1) > 0$. Но в правой полуокрестности точки $b_1 = 0$ кубическая парабола убывает, т.е. существует точка локального минимума при отрицательных значениях b_1. А если существуют две точки локальных минимумов, то между ними существует точка локального максимума, т.е. снова приходим к противоречию. Следовательно, для любого фиксированного $a_1^* \neq 0$ существует только одна точка на отрезке $[0,b]$, в которой функция $A_2(a_1^*,b_1)$ достигает своего наименьшего значения.

Если $a_1^* = 0$, то возможно, что функция $A_2(a_1^*,b_1)$ достигает своего наименьшего значения на отрезке $[0,b]$ на его концах, т.е. в двух точках. В этом случае функция $A_2^{\min}(a_1)$ непрерывна справа в точке $a_1 = 0$ и этого достаточно для её непрерывности на отрезке $[0,a]$.

Аналогично можно показать, что функция $A_2^{\max}(b_1)$ непрерывна на отрезке $[0,b]$. Следовательно, кривые $A_2^{\min}(a_1)$ и $A_2^{\max}(b_1)$ пересекаются и точка пересечения соответствует оптимальным чистым стратегиям сторон. ◄

Если число этапов предвыборной кампании $n > 2$, то нахождение оптимальных стратегий сторон становится довольно затруднительным. Кроме того, сторонам зачастую не требуется знать точные оптимальные стратегии, а необходимо лишь выбрать оптимальную стратегию из дискретного множества возможных стратегий. Поэтому в качестве альтернативы предлагается разбивать бюджеты сторон на несколько частей (до требуемой точности) и искать оптимальные стратегии сторон уже в матричных играх (по строкам - стратегии Власти, по столбцам – стратегии Оппозиции). Проиллюстрируем вышесказанное на примере.

Пример. Пусть к началу предвыборной кампании Власть имеет 15 млн., а Оппозиция – 12 млн. избирателей. На проведение кампании Властью выделено 6 млрд. у.е., Оппозицией – 9 млрд. у.е. Известно, что $\alpha = 0{,}020, \beta = 0{,}019, \gamma = 0{,}005, \nu = 0{,}7$ (это ожидаемые значения параметров с учётом предыдущих кампаний и настоящей ситуации). Например, $\alpha = 0{,}020$ означает, что Власть, вложив 1 млрд. у.е., привлечёт 2% сторонников Оппозиции. Пусть весь срок кампании разбит на 3 этапа, а бюджеты обеих сторон на 6 частей. Тогда множество стратегий каждой из сторон состоит из $C_{6+3-1}^{3-1} = 28$ вариантов, т.е. имеем матрицу ожидае-

мого числа сторонников Власти 28×28. Подсчитав значения целевой функции для каждого из вариантов, получим, что в этом случае существуют оптимальные чистые стратегии сторон. Власти следует на первом этапе не вкладывать ничего, на втором – 2 млрд. у.е., на третьем – 4 млрд. у.е. Оппозиции следует на первом этапе вложить 1,5 млрд. у.е., на втором – 3 млрд. у.е., на третьем – 4,5 млрд. у.е. При этом на момент выборов ожидаемое число сторонников Власти равно 13024710.

В заключение отметим, что, рассмотрев достаточно количество числовых примеров, можно заметь, что сохраняется общая тенденция вложения большей части средств в конце предвыборной кампании.

РЕЗЮМЕ

Розглянута задача оптимального розподілу інформаційних ресурсів між партіями із застосуванням теоретико-ігрових моделей. Розглянута задача оптимального розподілу бюджетів сторін протягом передвиборчої кампанії без урахування і з урахуванням дії реклами на попередніх етапах. Доведено, що в задачі без урахування дії реклами оптимальними стратегіями сторін є внесок усіх коштів в останньому періоді. Якщо загальна кількість періодів передвиборчої кампанії дорівнює двом, то в задачі з урахуванням дії реклами сторони мають оптимальні чисті стратегії. Запропоновані способи знаходження оптимальних стратегій сторін.

SUMMARY

The problem of optimal allocation of information resources between parties with use of game theory models is considered. The problem of optimal allocation of parties' budgets during electoral campaign is considered without and with taking into account advertisement effect of the previous periods. It is proved that investment of all the assets during the last period is the optimal strategy for each party in the problem without taking into account the advertisement effect. The parties have optimal pure strategies if the total number of electoral campaign periods is two and we take into consideration the advertisement effect. Methods for finding of optimal strategies are proposed.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Васин А.А., Сосина Ю.В. Об оптимальном распределении информационных ресурсов в избирательной кампании // Математическое моделирование. – 2004. – Том 16, №8. – С.24-38.
2. Берзин Е.А. Оптимальное распределение ресурсов и теория игр. – М.: «Радио и связь», 1983. – 216 с.
3. Крушевский А.В. Теория игр. – К.: «Вища школа», 1977. – 216 с.
4. Дж. Фон Нейман, О.Моргенштейн. Теория игр и экономическое поведение. – М.: «Наука», 1970. – 708 с.

Надійшла до редакції 20.11.2007 р.

М Е Х А Н І К А

УДК 539.3

ВЯЗКОУПРУГИЙ ИЗГИБ МНОГОСВЯЗНЫХ ИЗОТРОПНЫХ ПЛИТ

С.А.Калоеров, Ю.С.Шипоша

В современном машиностроении, авиастроении, технике широко используются конструкции, элементами которых являются тонкие плиты, изготовленные из полимерных материалов. Зачастую эти элементы имеют отверстия и находятся под действием усилий, приводящих к изгибу плит. В процессе эксплуатации таких плит могут возникать высокие концентрации напряжений и деформаций, меняющиеся со временем. Поэтому разработка методов определения напряженно-деформированного состояния вязкоупругих плит и решение на их основе практических задач представляют большой интерес. К настоящему времени решены различные задачи линейной теории вязкоупругости. При этом использовались методы комплексных потенциалов, малого параметра [1–3] и принцип Вольтерра [4, 5]. В данной статье эти методы распространены на многосвязные плиты с произвольным числом отверстий.

1. Постановка и решение задачи об изгибе упругой многосвязной плиты. Рассмотрим плиту постоянной толщины h, в срединной плоскости которой получается многосвязная область S, ограниченная внешним контуром L_0 и контурами отверстий $L_l\ (l=\overline{1,\mathcal{L}})$ (рис.1). Плита находится под действием распределенных по верхнему основанию усилий $q(x,y)$, изгибающих моментов и поперечных сил, действующих на ее контурах. Как частный будем рассматривать и случай бесконечной многосвязной плиты, когда контур L_0 отсутствует (целиком уходит в бесконечность). В последнем случае будем считать, что на бесконечности заданы изгибающие и крутящий моменты M_x^∞, M_y^∞, H_{xy}^∞.

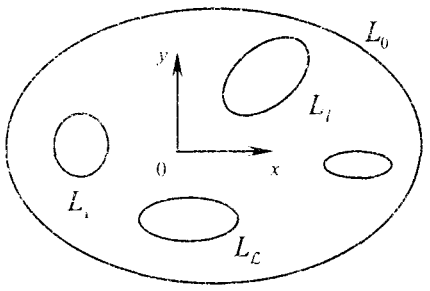


Рис. 1

Если задачу об изгибе рассматриваемой плиты в упругой постановке решать с использованием функций $\varphi(z)$ $\psi(z)$ комплексной переменной z, то после нахождения этих функций, можно вычислять прогиб, моменты и перерезывающие силы на основных площадках по формулам [2]

$$w=\frac{1}{D}\left\{w_1+\mathrm{Re}\left[\bar{z}\varphi(z)+\int\psi(z)dz\right]\right\}, \tag{1.1}$$

$$\mathrm{M}_x+\mathrm{M}_y=-4(1+\nu)\left[\mathrm{Re}\,\varphi'(z)+\frac{\partial^2 w_1}{\partial z\partial\bar{z}}\right],$$

$$\mathrm{M}_x-\mathrm{M}_y+2i\mathrm{H}_{xy}=2(1-\nu)\left[\bar{z}\varphi''(z)+\psi'(z)+2\frac{\partial^2 w_1}{\partial z^2}\right]; \tag{1.2}$$

$$\mathrm{N}_x-i\mathrm{N}_y=-4\left[\varphi''(z)+2\frac{\partial^3 w_1}{\partial z^2\partial\bar{z}}\right], \tag{1.3}$$

где $D=\dfrac{\mathrm{E}h^3}{12(1-\nu^2)}$; E, ν – модуль Юнга и коэффициент Пуассона материала, h – толщина плиты; w_1 – частное решение уравнения

$$\nabla^2\nabla^2 w=\frac{1}{D}q(x,y). \tag{1.4}$$

По известным моментам и перерезывающим силам на основных площадках можно найти изгибающий и крутящий моменты, перерезывающую силу на любой площадке с нормалью n, а также напряжения на основных площадках:

© Калоеров С.А., Шипоша Ю.С.

$$M_n = M_x \cos^2 nx + M_y \cos^2 ny + 2H_{xy} \cos nx \cos ny,$$
$$H_{ns} = (M_y - M_x)\cos nx \cos ny + H_{xy}(\cos^2 nx - \cos^2 ny),$$
$$N_n = N_x \cos nx + N_y \cos ny; \qquad (1.5)$$
$$\sigma_x = \frac{12M_x}{h^3} z^*, \quad \sigma_y = \frac{12M_y}{h^3} z^*, \quad \tau_{xy} = \frac{12H_{xy}}{h^3} z^*,$$
$$\tau_{xz} = \frac{6N_x}{h^3}\left(\frac{h^2}{4} - z^{*2}\right), \quad \tau_{yz} = \frac{6N_x}{h^3}\left(\frac{h^2}{4} - z^{*2}\right). \qquad (1.6)$$

Здесь z^* – толщинная координата системы декартовых координат $Oxyz$, плоскость Oxy которой совпадает со срединной плоскостью плиты.

Комплексные потенциалы на контурах области S должны удовлетворять определенным граничным условиям. Так, в случае загруженного и жестко подкрепленного края они имеют вид [5]

$$K_1\varphi(t) + K_2\left[t\overline{\varphi'(t)} + \overline{\psi(t)}\right] = f(t) + ic_l t. \qquad (1.7)$$

При этом, если контур загружен заданными распределенными усилиями $p(s)$ и моментами $m(s)$, то

$$K_1 = \frac{3+\nu}{1-\nu}, \quad K_2 = -1,$$
$$f(t) = \frac{1}{\nu - 1} J(t) + \frac{8}{1-\nu}\left[\int_0^s t\frac{\partial^3 w_1}{\partial t^2 \partial \bar{t}} dt - t\int_0^s \frac{\partial^3 w_1}{\partial t^2 \partial \bar{t}} dt\right] + 2\frac{\partial w_1}{\partial \bar{t}},$$
$$J(t) = \int_0^s [m(s) + iQ(s)]ds, \quad Q = \int_0^s p(s)ds, \qquad (1.8)$$

c_l – постоянные, определяемые в процессе решения задач; если же контур жестко подкреплен, то

$$K_1 = K_2 = 1, \quad c_l = 0, \quad f(t) = -2\frac{\partial w_1}{\partial \bar{t}}. \qquad (1.9)$$

В случае опертого края плиты, загруженного усилиями и моментами, граничные условия имеют вид

$$\mathrm{Re}\left[\bar{z}\varphi(z) + \int \psi(z)dz\right] = -w_1,$$
$$\mathrm{Re}\left\{(1-\nu)\delta^2\left[\bar{t}\varphi'' + \psi'(t)\right] - 2(1+\nu)\varphi'(t)\right\} = g(t). \qquad (1.10)$$

Здесь $g(t) = m(s) - (1-\nu)\left[\delta^2 \partial^2 w_1/\partial t^2 + \bar{\delta}^2 \partial^2 w_1/\partial \bar{t}^2\right] + 2(1+\nu)\partial^2 w_1/\partial t \partial \bar{t}$, $\delta = dt/ds$

Комплексный потенциал $\varphi(z)$ является инвариантным по отношению к переносу начала координат, а $\psi(z)$ не обладает таким свойством. Поэтому вместо последней часто вводят новую функцию [2]

$$\omega(z) = z\varphi'(z) + \psi(z). \qquad (1.11)$$

Через комплексные потенциалы $\varphi(z)$ и $\omega(z)$ получаются следующие выражения для прогиба, моментов и перерезывающих сил

$$w = \frac{1}{D}\left\{w_1 + \mathrm{Re}\left[(\bar{z} - z)\varphi(z) + \int \omega(z)dz\right]\right\}; \qquad (1.12)$$
$$M_x + M_y = -4(1+\nu)\mathrm{Re}\left[\varphi'(z) + \frac{\partial^2 w_1}{\partial z \partial \bar{z}}\right],$$

$$\mathrm{M}_y - \mathrm{M}_x + 2i\mathrm{H}_{xy} = 2(1-\nu)\left[\left(\bar{z}-z\right)\varphi''(z) - \varphi'(z) + \omega'(z) + 2\frac{\partial^2 w_1}{\partial z^2}\right], \tag{1.13}$$

$$\mathrm{N}_x - i\mathrm{N}_y = -4\left[\varphi''(z) + 2\frac{\partial^3 w_1}{\partial z^2 \partial \bar{z}}\right], \tag{1.14}$$

а граничные условия (1.7) будут такими:

$$K_1\varphi(t) + K_2\left[\left(t-\bar{t}\right)\overline{\varphi'(t)} + \overline{\omega(t)}\right] = f(t) + ic_l t\,. \tag{1.15}$$

В общем случае многосвязной области комплексные потенциалы имеют вид [5, 6]

$$\varphi(z) = \Gamma z + \frac{1}{8\pi}\sum_{l=1}^{L}\left[(P_l + P_{ql})\left(z-\bar{z}_l\right) - \mathrm{M}_{yl} + i\mathrm{M}_{xl} - \mathrm{M}_{ql}\right]\ln(z-z_l) +$$

$$+\sum_{j=1}^{J}\left[P_j^0\left(z-\bar{z}_j^0\right) - \mathrm{M}_{yj}^0 + i\mathrm{M}_{xj}^0\right]\ln\left(z-z_j^0\right) + \varphi^*(z)\,,$$

$$\psi(z) = \Gamma' z - \frac{1}{8\pi}\sum_{l=1}^{L}\left[(P_l + P_{ql})\bar{z}_l + \mathrm{M}_{yl} + i\mathrm{M}_{xl} + \overline{\mathrm{M}}_{ql}\right]\ln(z-z_l) -$$

$$-\sum_{j=1}^{J}\left[\bar{P}_j^0 z_j^{-0} + \mathrm{M}_{yl} + i\mathrm{M}_{xl}\right]\ln\left(z-z_j^0\right) + \psi^*(z)\,,$$

$$\omega(z) = \Gamma^* z - \frac{1}{8\pi}\sum_{l=1}^{L}\left[(P_l + P_{ql})\left(\bar{z}_l - z_l\right) + \mathrm{M}_{yl} + i\mathrm{M}_{xl} + \overline{\mathrm{M}}_{ql}\right]\ln(z-z_l) -$$

$$-\sum_{j=1}^{J}\left[\bar{P}_j^0\left(z-\bar{z}_j^0\right) + \mathrm{M}_{yj}^0 + i\mathrm{M}_{xj}^0\right]\ln\left(z-z_j^0\right) + \omega^*(z)\,. \tag{1.16}$$

где Γ, Γ', Γ^* – постоянные, равные нулю в случае конечной многосвязной области и определяемые выражениями

$$\Gamma = -\frac{\mathrm{M}_x^\infty + \mathrm{M}_y^\infty}{4(1+\nu)}, \quad \Gamma' = \frac{\mathrm{M}_y^\infty - \mathrm{M}_x^\infty + 2i\mathrm{H}_{xy}^\infty}{2(1-\nu)}, \quad \Gamma^* = \Gamma + \frac{\mathrm{M}_y^\infty - \mathrm{M}_x^\infty + 2i\mathrm{H}_{xy}^\infty}{2(1-\nu)} \tag{1.17}$$

в случае бесконечной области;

$$P_{ql} = 8i\int_{L_l}\frac{\partial^3 w_1}{\partial z^2 \partial \bar{z}}dz\,, \quad \mathrm{M}_{ql} = 8i\int_{L_l}(z-z_l)\frac{\partial^3 w_1}{\partial z^2 \partial \bar{z}}dz\,; \tag{1.18}$$

P_l и M_{xl}, M_{yl} – главный вектор и компоненты главного момента внешних усилий, приложенных к контуру L_l; z_l – аффикс произвольной точки внутри этого контура; P_j^0 и M_{xj}^0, M_{yj}^0 – поперечная сосредоточенная сила и компоненты сосредоточенного момента в точке z_j^0; $\varphi^*(z)$, $\psi^*(z)$, $\omega^*(z)$ – функции, голоморфные в рассматриваемой многосвязной области S, включая точки приложения сосредоточенных сил и моментов, а в случае бесконечной области и точку $z=\infty$. Построение общего вида этих функций и их определение из граничных условий приводятся ниже.

2. Решение задачи о вязкоупругом изгибе плиты с неподкрепленными контурами. Решение задачи вязкоупругости для рассматриваемой плиты будем проводить с помощью принципа Вольтерра. Так как для вязкоупругих материалов эффекты объемной ползучести и релаксации малы, изменение модуля объемного расширения материала пренебрежимо мало и при использовании принципа Вольтерра нет необходимости заменять модуль объемного расширения временным оператором. Тогда решение задачи вязкоупругости определяется операторным коэффициентом Пуассона ν. Приведем это решение для слу-

чая, когда отсутствуют распределенные усилия по верхнему основанию плиты ($q(x, y) = 0$), сосредоточенные силы и моменты, а на контурах отверстий главные векторы и главные моменты внешних усилий на каждом из них равны нулю. В этом случае функции (1.16) примут вид

$$\varphi(z) = \Gamma z + \varphi^*(z), \quad \psi(z) = \Gamma' z + \psi^*(z), \quad \omega(z) = \Gamma^* z + \omega^*(z). \tag{2.1}$$

Коэффициент Пуассона представим в виде

$$\nu = \nu_0 + \lambda, \tag{2.2}$$

где ν_0 – мгновенное значение коэффициента Пуассона; λ – малый параметр, равный отклонению ν от ν_0. Тогда условия (1.15) и (1.7) для контура, загруженного распределенными усилиями и моментами, примут вид [3]

$$(3+\lambda+\nu_0)\varphi^*(t) - (1-\lambda-\nu_0)\left[t\overline{\varphi^{*\prime}(t)} + \overline{\psi^*(t)}\right] = \frac{M_x^\infty + M_y^\infty + 2iH_{xy}^\infty}{2}t + \frac{M_y^\infty - M_x^\infty + 2iH_{xy}^\infty}{2}\bar{t} + i(1-\nu_0-\lambda)c_1 t + (1-\nu_0-\lambda)f(t), \tag{2.3}$$

$$(3+\lambda+\nu_0)\varphi^*(t) - (1-\lambda-\nu_0)\left[(t-\bar{t})\overline{\varphi^{*\prime}(t)} + \overline{\omega^*(t)}\right] = \frac{M_x^\infty + M_y^\infty + 2iH_{xy}^\infty}{2}t + \frac{M_y^\infty - M_x^\infty + 2iH_{xy}^\infty}{2}\bar{t} + i(1-\nu_0-\lambda)c_1 t + (1-\nu_0-\lambda)f(t). \tag{2.4}$$

Разложим функции $\varphi^*(z)$, $\psi^*(z)$, $\omega^*(z)$ и постоянные c_l в ряды по степеням малого параметра λ:

$$\left(\varphi^*(z), \psi^*(z), \omega^*(z), c_l\right) = \sum_{j=0} \lambda^j \left(\varphi_j(z), \psi_j(z), \omega_j(z), c_{lj}\right). \tag{2.5}$$

Подставив (2.5) в условия (2.3), (2.4) и приравняв в полученных равенствах коэффициенты при одинаковых степенях малого параметра λ, получим рекуррентную последовательность граничных условий

$$\text{ж}_0\varphi_j(t) - t\overline{\varphi'_j(t)} - \overline{\psi_j(t)} = \frac{\delta_j^0 - 1}{1-\nu_0}\left[\varphi_{j-1}(t) + t\overline{\varphi'_{j-1}(t)} + \overline{\psi_{j-1}(t)} + i\,c_{lj-1}\,t\right] + \frac{\delta_j^0}{1-\nu_0}\left[\frac{M_x^\infty + M_y^\infty + 2iH_{xy}^\infty}{2}t + \frac{M_y^\infty - M_x^\infty + 2iH_{xy}^\infty}{2}\bar{t} - J(t) + (1-\nu_0)ic_{l0}t\right]; \tag{2.6}$$

$$\text{ж}_0\varphi_j(t) - (t-\bar{t})\overline{\varphi'_j(t)} - \overline{\omega_j(t)} = \frac{\delta_j^0 - 1}{1-\nu_0}\left[\varphi_{j-1}(t) + (t-\bar{t})\overline{\varphi'_{j-1}(t)} + \overline{\omega_{j-1}(t)} + i\,c_{lj-1}\,t\right] + \frac{\delta_j^0}{1-\nu_0}\left[\frac{M_x^\infty + M_y^\infty + 2iH_{xy}^\infty}{2}t + \frac{M_y^\infty - M_x^\infty + 2iH_{xy}^\infty}{2}\bar{t} - J(t) + (1-\nu_0)ic_{l0}\,t\right], \tag{2.7}$$

где

$$\text{æ}_0 = (3+\nu_0)/(1-\nu_0), \quad (j = 1,2,3,\ldots). \tag{2.8}$$

Для многосвязных областей при удовлетворении граничным условиям задачи с использованием метода наименьших квадратов удобнее использовать граничные условия в дифференциальной форме. Дифференцируя условия (2.6) и (2.7) по дуге контура будем иметь

$$\text{æ}_0\delta\Phi_j(t) - \delta\overline{\Phi_j(t)} - \bar{\delta}\,t\,\overline{\Phi'_j(t)} - \bar{\delta}\,\overline{\Psi_j(t)} = \frac{\delta_j^0 - 1}{1-\nu_0}\left[\delta\Phi_{j-1}(t) + \delta\overline{\Phi_{j-1}(t)} + \bar{\delta}\,t\,\overline{\Phi'_{j-1}(t)} + \bar{\delta}\,\overline{\Psi_{j-1}(t)} + i\,c_{lj-1}\,\delta\right] +$$

$$+\frac{\delta_j^0}{1-\nu_0}\left[\frac{M_x^\infty+M_y^\infty+2iH_{xy}^\infty}{2}\delta+\frac{M_y^\infty-M_x^\infty+2iH_{xy}^\infty}{2}\bar{\delta}-\delta J'(t)+(1-\nu_0)ic_{l0}t\right]; \tag{2.9}$$

$$æ_0\delta\Phi_j(t)-(\delta-\bar{\delta})\overline{\Phi_j(t)}-\bar{\delta}(t-\bar{t})\overline{\Phi'_j(t)}-\bar{\delta}\,\overline{\Omega_j(t)}=$$

$$=\frac{\delta_j^0-1}{1-\nu_0}\left[\delta\Phi_{j-1}(t)+(\delta-\bar{\delta})\overline{\Phi_{j-1}(t)}+\bar{\delta}(t-\bar{t})\overline{\Phi'_{j-1}(t)}+\bar{\delta}\,\overline{\Omega_{j-1}(t)}+i\,c_{lj-1}\delta\right]+$$

$$+\frac{\delta_j^0}{1-\nu_0}\left[\frac{M_x^\infty+M_y^\infty+2iH_{xy}^\infty}{2}\delta+\frac{M_y^\infty-M_x^\infty+2iH_{xy}^\infty}{2}\bar{\delta}-\delta J'(t)+(1-\nu_0)ic_{l0}t\right], \tag{2.10}$$

где $\Phi(z)=\varphi'(z)$, $\Psi(z)=\psi'(z)$, $\Omega(z)=\omega'(z)$ $(j=1, 2, 3,...)$.

После определения функций из граничных условий (2.6), (2.7) или (2.9), (2.10) на основании принципа Вольтерра можно найти функции (2.5), а по ним и (2.1) для любого момента времени.

На основе принципа Вольтерра параметр λ^j $(j\geq 1)$ заменим значениями функций $T_j(t)$:

$$\lambda^j=T_j(t)=\lambda^{*j}\cdot 1=\left(\nu^*-\nu_0\right)^j\cdot 1, \tag{2.11}$$

где ν^* – операторный коэффициент Пуассона, который, следуя [4], аппроксимируем выражением

$$\nu^*=\nu_0\left(1+\delta_*\,\mathcal{Э}_\alpha^*(-\beta)\right), \tag{2.12}$$

причем для вычисления значений воздействия оператора Работнова на единицу необходимо использовать формулу [5]

$$\mathcal{Э}_\alpha^*(-\beta)\cdot 1=\frac{1}{\beta}\left\{1-\exp\left[-\beta\left[(1-\alpha)t\right]^{1-\alpha}\right]\right\}; \tag{2.13}$$

α, β, δ_* – реологические постоянные материала.

Учитывая (2.13) и свойство возведения резольвентных операторов в степень, функции (2.11) запишем в виде

$$T_j(t)=\nu_0^j\,\delta_*^j\,\mathcal{Э}_\alpha^{*j}(-\beta)\cdot 1=\nu_0^j\,\delta_*^j\,\frac{(-1)^{j-1}}{(1-j)!}\frac{\partial^{j-1}}{\partial\beta^{j-1}}\left[\mathcal{Э}_\alpha^*(-\beta)\cdot 1\right].$$

Тогда окончательно

$$\lambda^j=T_j(t)=\frac{\nu_0^j\,\delta_*^j}{\beta^j}\left[1-e^{-\beta\tau}\sum_{r=0}^{j-1}\frac{(\beta\tau)^r}{r!}\right], \tag{2.14}$$

где $\tau=\left[(1-\alpha)t\right]^{1-\alpha}$.

Подставляя значения λ^j по формуле (2.14) в выражения (2.5), найдем значения функций (2.1) и вычислим изгибающие моменты (1.13) и поперечные силы (1.14).

3. Изгиб вязкоупругой бесконечной плиты с эллиптическими отверстиями. Рассмотрим бесконечную плиту с эллиптическими отверстиями с незагруженными контурами L_l $\left(l=\overline{1,\mathcal{L}}\right)$, изгибаемую на бесконечности моментами M_x^∞, M_y^∞. В этом случае производные функций (2.1) имеют вид

$$\Phi(z)=\Gamma+\sum_{j=0}\Phi_j(z),\quad \Omega(z)=\Gamma+\sum_{j=0}\Omega_j(z), \tag{3.1}$$

в котором $\Phi_j(z)$, $\Omega_j(z)$ – функции, голоморфные вне отверстий плиты. Используя конформные ото-

бражения внешности единичного круга $|\zeta_l| \ge 1$ на внешности исходных эллипсов

$$z = z_{0l} + R_l\left(\zeta_l + \frac{m_l}{\zeta_l}\right), \tag{3.2}$$

где $R_l = (a_l + b_l)/2$, $m_l = (a_l - b_l)/(a_l + b_l)$, для этих функций получаем [7]

$$\Phi_j(z) = \sum_{l=1}^{L}\sum_{n=1}^{\infty}\varphi_{ln}(z)a_{jln},$$

$$\Omega_j(z) = \sum_{l=1}^{L}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\psi_{ln}(z)a_{jln} + \varphi_{ln}(z)\bar{b}_{jln}\right). \tag{3.3}$$

При этом

$$\varphi_{ln}(z) = \frac{1}{\zeta_l^{n-1}(\zeta_l^2 - m_l)},$$

$$\psi_{ln}(z) = \frac{1}{\zeta_l^{n-1}(\zeta_l^2 - m_l)^3}\left\{ c_{l2}\zeta_l^2 + c_{l1}\zeta_l + n\left[d_{l4}\zeta_l^4 + d_{l2}\zeta_l^2 + d_{l0}\right]\right\},$$

$$c_{l2} = -2(m_l - 1)^2, \quad d_{l4} = m_l - 1, \quad d_{l2} = m_l^2 - 1, \quad d_{l0} = m_l(1 - m_l); \tag{3.4}$$

a_{jln}, b_{jln} – неизвестные постоянные, которые определим из граничных условий на контурах отверстий с использованием метода наименьших квадратов.

Составим функционал

$$J = \sum_{m=1}^{M}\left| æ_0\delta\Phi_j(t_m) - \left(\delta - \bar{\delta}\right)\overline{\Phi_j(t_m)} - \right.$$

$$\left. -\bar{\delta}\left(t_m - \overline{t_m}\right)\overline{\Phi'_j(t_m)} - \bar{\delta}\,\overline{\Omega_j(t_m)} - f_j(t_m)\right|^2, \tag{3.5}$$

в котором t_m – система точек, выбираемых на контурах L_l $\left(l = \overline{1, L}\right)$;

$$f_j(t) = \frac{\delta_j^0 - 1}{1 - \nu_0}\left[\delta\Phi_{j-1}(t) + \left(\delta - \bar{\delta}\right)\overline{\Phi_{j-1}(t)} + \bar{\delta}\left(t - \bar{t}\right)\overline{\Phi'_{j-1}(t)} + \bar{\delta}\,\overline{\Omega_{j-1}(t)} + i\,c_{lj-1}\,\delta\right] +$$

$$+\frac{\delta_j^0}{1 - \nu_0}\left(\frac{M_x^\infty + M_y^\infty}{2}\delta + \frac{M_y^\infty - M_x^\infty}{2}\bar{\delta} + (1 - \nu_0)ic_{l0}\,\delta\right).$$

Удовлетворяя условиям минимума $\partial J/\partial a_{jln} = 0$, $\partial J/\partial \bar{b}_{jln} = 0$ функционала (3.5), получаем

$$\sum_{m=i}^{M}\left\{ r_{iln1}\Phi_j(t_m) + r_{iln2}\Phi'_j(t_m) + r_{iln3}\overline{\Phi_j(t_m)} + r_{iln4}\overline{\Phi'_j(t_m)} + r_{iln5}\Omega_j(t_m) + \right.$$

$$\left. + r_{iln6}\overline{\Omega_j(t_m)} - \psi_{iln}(t_m)f_j(t_m) - \varphi_{iln}(t_m)\overline{f_j(t_m)}\right\} = 0, \tag{3.6}$$

где

$$r_{iln1} = \left(\delta - \bar{\delta}\right)\varphi_{iln}(t_m) + æ_0\delta\psi_{iln}(t_m), \quad r_{iln2} = \delta\left(t_m - \overline{t_m}\right)\varphi_{iln}(t_m),$$

$$r_{iln3} = æ_0\,\bar{\delta}\varphi_{iln}(t_m) - \left(\delta - \bar{\delta}\right)\psi_{iln}(t_m), \quad r_{iln4} = -\bar{\delta}\left(t_m - \overline{t_m}\right)\psi_{iln}(t_m),$$

$$r_{iln5} = -\delta\varphi_{iln}(t_m), \quad r_{iln6} = -\bar{\delta}\psi_{iln}(t_m), \quad \varphi_{2ln}(t_m) = 0 \quad (i = \overline{1,2}). \tag{3.7}$$

Подставив выражения (3.3) в уравнения (3.6), получим следующую систему линейных алгебраи-

ческих уравнений:

$$\sum_{m=l}^{M}\sum_{r=1}^{L}\sum_{p=1}^{\infty}\Big\{\Big[r_{ilm1}\varphi_{rp}(t_m)+r_{ilm2}\varphi'_{rp}(t_m)+r_{ilm5}\psi_{rp}(t_m)\Big]a_{jrp}+$$

$$\Big[r_{ilm3}\overline{\varphi_{rp}(t_m)}-r_{ilm4}\overline{\varphi'_{rp}(t_m)}+r_{ilm6}\overline{\psi_{rp}(t_m)}\Big]\overline{a_{jrp}}+$$

$$r_{ilm6}\overline{\varphi_{rp}(t_m)}b_{jrp}+r_{ilm5}\varphi_{rp}(t_m)\overline{b_{jrp}}\Big\}=$$

$$=\sum_{m=1}^{M}\Big[\psi_{iln}(t_m)f_j(t_m)+\varphi_{iln}(t_m)\overline{f_j(t_m)}\Big]\quad\Big(i=\overline{1,2},\ l=\overline{1,\mathcal{L}},\ n=1,2,...\Big). \tag{3.8}$$

После решения системы (3.8), используя принцип Вольтерра, для любого момента времени можно найти функции (2.1) и вычислять изгибающие моменты и поперечные силы.

4. Исследования вязкоупругого изгиба плиты с двумя отверстиями. Проведены численные исследования распределения изгибающих моментов в плите с двумя эллиптическими отверстиями (рис.2) в зависимости от геометрических характеристик плиты и времени приложения нагрузки. Плита считалась изготовленной из алюминия, для которой $\nu = 0.25$, $\alpha = -0.5$, $\beta = 6.65\cdot 10^{-3}$, $\delta_* = 6.15\cdot 10^{-3}$.

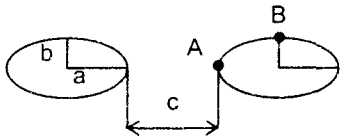


Рис. 2

При проведении расчетов количество членов рядов (3.3) и количество «коллокационных» точек M на контурах L_l увеличивались до тех пор, пока граничные условия на контурах не удовлетворялись с достаточно высокой степенью точности. Для такого удовлетворения граничным условиям, как показали численные исследования, достаточно брать на каждом из контуров L_l точек M от 100 до 200, а число членов рядов от каждого контура – в пределах от 10 до 40. Количество приближений j по степеням малого параметра λ увеличивалось до тех пор, пока последующее приближение изменяло максимальные значения моментов в предыдущем приближении более чем на 0,01%. Для удовлетворения этому условию в рассмотренных случаях достаточно было оставлять степени малого параметра λ от 6 до 10. Результаты исследований приведены для двух значений времени отсчета, t=0 и 100 часов. Это связано с тем, что уже через 80 час. после приложения нагрузки значения моментов практически не изменялись, т.е. в плите устанавливливалось стационарное состояние.

В табл. 1 для некоторых точек контура плиты с двумя круговыми отверстиями приведены значения изгибающего момента M_θ для площадки, перпендикулярной к контуру, в зависимости от отношения c/R расстояния между отверстиями к радиусу одного из них. Как следует из этих данных, что сближение отверстий друг с другом в случае изгиба плиты моментами M_x^∞ приводит к уменьшению значений M_θ, а в случае изгиба моментами M_y^∞ – к увеличению значений M_θ. С течением времени в случае действия M_x^∞ в точке A значение момента M_θ уменьшается, а при действии M_y^∞ оно увеличивается. Для точке B влияние времени противоположно результатам для точки A.

Таблица 1

Точка	t, час.	c/R									
		10	5	2	1	0,5	10	5	2	1	0,5
		Случай действия M_x^∞					Случай действия M_y^∞				
A	0	0,229	0,226	0,221	0,219	0,219	1,789	1,799	1,846	1,896	1,946
	100	0,148	0,146	0,142	0,141	0,141	1,862	1,882	1,932	1,985	2,039
B	0	1,761	1,746	1,705	1,670	1,646	0,218	0,218	0,219	0,219	0,223
	100	1,841	1,823	1,776	1,737	1,712	0,139	0,139	0,141	0,141	0,144

В табл. 2 для плиты с двумя эллиптическими отверстиями приведены значения M_θ в зависимости от отношений b/a и c/a их полуосей и расстояния между ними к полуоси a. Как видно, уменьшение

Таблица 2

c/a	Точка	t, час.	b/a					
			2	0,5	0,1	2	0,5	0,1
			Случай действия M_x^∞			Случай действия M_y^∞		
0,5	A	0	0,225	0,226	0,228	1,502	2,879	7,34
		100	0,144	0,145	0,147	1,551	3,068	8,31
	B	0	2,25	1,324	1,064	0,231	0,225	0,232
		100	2,378	1,358	1,071	0,149	0,145	0,149
0,1	A	0	0,224	0,224	0,226	1,533	2,981	7,712
		100	0,144	0,144	0,145	1,587	3,184	8,492
	B	0	2,223	1,317	1,062	0,249	0,241	0,135
		100	2,352	1,35	1,068	0,161	0,155	0,087

отношения полуосей приводит к увеличению момента M_θ в точке A и к его уменьшению в точке B. Закономерности изменения M_θ в зависимости от расстояния между отверстиями и времени такие же, как и в случае плиты с круговыми отверстиями.

РЕЗЮМЕ

Запропонована методика рішення задач в'язкопружного згину багатозв'язних плит з використанням методів комплексних потенціалів, малого параметра і найменших квадратів. Проведені чисельні дослідження зміни моментів для плити з двома круговими або еліптичними отворами.

SUMMARY

The method based on the use properties of complex potentials, small parameter and least-squares method for solve of viscoelastic bend the multiconnected plates was proposed. The numeral researches of change the moments for a plate with two circular or elliptic openings are conducted.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иванов Г.М., Космодамианский А.С., Шкодина Л.Н. Напряженно-деформированное состояние вязкоупругих многосвязных плит // Тр.X Всесоюз. конф. по теории оболочек и пластин. – Тбилиси: Мецниереба, 1975. – Т.1. – С. 435-440.
2. Космодамианский А.С. Иванов Г.М. Изгиб тонких многосвязных плит: Учеб. пособие. – Донецк, 1973. - 264 с.
3. Калоеров С.А., Мироненко А.Б. Исследование вязкоупругого состояния пластинки с жесткими эллиптическими или линейными включениями // Вісн. Донец. ун-ту. Сер. А: Природн. науки. – 2005. – Вип.1, ч.1. – С. 61-69.
4. Работнов Ю.Н. Равновесие упругой среды с последствием // Прикладная математика и механика. – 1948. – Т. 12, № 1. – С. 53-62.
5. Савин Г.Н. Распределение напряжений около отверстий. – К.: Наук. думка, 1968. - 888 с.
6. Лехницкий С.Г. Теория упругости анизотропного тела – М.: Наука, 1977. – 416 с.
7. Вакуленко С.В., Калоеров С.А.,. Приближенный метод определения напряженного состояния многосвязной изотропной полуплоскости с отверстиями и трещинами // Теорет. и прикладная механика. – 2002. – Вып.36. – С.65-76.

Надійшла до редакції 12.11.2007 р.

УДК 539.3

О ЗОНЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПРЕДРАЗРУШЕНИЯ В ОКРЕСТНОСТИ ВЕРШИНЫ ТРЕЩИНЫ В ПЬЕЗОКЕРАМИЧЕСКОМ МАТЕРИАЛЕ

В.Б.Говоруха,
Днепропетровский национальный университет

Эффекты взаимодействия полей различной природы находят все большее применение в многообразных технических устройствах. В частности, пьезокерамические материалы широко используются при создании различных преобразователей и датчиков в радиоэлектронике, измерительной и вычислительной технике. Однако одним из основных недостатков этих материалов является их хрупкость. Пьезокерамики склонны к развитию трещин, растущих вследствие концентрации напряжений, вызванной механическими и электрическими воздействиями, что может привести к разрушению всего тел. Это приводит к необходимости более полного изучения различных аспектов процессов разрушения пьезокерамик и разработки практических методов расчета на прочность пьезокерамических элементов конструкций.

К настоящему времени в литературе имеется достаточно много различного рода исследований и конкретных результатов в области механики разрушения пьезокерамических материалов. Так в работе [1] изучена концентрация напряжений на контуре эллиптического отверстия в пьезокерамической полуплоскости при действии на ее границе точечного электрического заряда. Граничная задача механики разрушения для прямолинейной трещины на границе пьезоэлектрика с проводником решена в [2]. В работе [3] для определения двумерного электроупругого состояния анизотропных тел использованы функции комплексного переменного. В случае двумерных многосвязных тел с полостями и трещинами общие соотношения для комплексных потенциалов получены в [4]. Методам исследования сопряженных электроупругих полей, связанных с постановками и решениями граничных задач электроупругости посвящены работы [5, 6].

В то же время следует отметить, что большинство имеющихся в литературе исследований относится к задачам электроупругости, сформулированным в рамках линейной теории пьезоэлектричества. Однако, свойства поляризованной керамики в значительной степени определяются ее доменной структурой. В связи с этим зависимость между компонентами напряжений и деформаций, электрическим полем и индукцией у пьезокерамик является линейной только в определенной и ограниченной области действующих механических напряжений и электрических полей. Формальное применение линейной теории электроупругости к нахождению электроупругих полей в малой окрестности вершины трещины противоречит опытным данным и приводит к физически неоправданным результатам [7]. Для устранения указанных противоречий, по аналогии с известной моделью Леонова-Панасюка-Дагдейла [8], в работе [9] была предложена расчетная модель пьезокерамического тела с трещиной, предполагающая наличие в полосе на продолжении трещины зон электрического предразрушения. При этом считается, что максимальное значение нормальной составляющей вектора электрической индукции в таком теле не превосходит величины D_S -- границы электрической насыщенности пьезокерамики. В подобной постановке задачи теории электроупругости рассматривалась в [10]. Настоящая работа является продолжением исследований в этом направлении. В ней строится точное аналитическое решение плоской задачи электроупругости для однородного пьезокерамического тела с трещиной при наличии зон электрического предразрушения в окрестности ее вершин, а также формулируются основные параметры разрушения этой модели.

Постановка и построение решения задачи. Рассмотрим отнесенную к декартовой системе координат $Ox_1x_2x_3$ неограниченную и поляризованную в направлении оси Ox_3 однородную пьезокерамическую среду с изолированной туннельной трещиной в плоскости $x_3 = 0$ на участке $|x_1| < a$ (рис 1). Будем рассматривать задачу о плоской деформации при условии, что на берегах трещины отсутствуют свободные электрические заряды и механическая нагрузка, а на бесконечности заданы постоянное растягивающее напряжение σ_{33}^{∞} и электрическая индукция D_3^{∞}. Заметим при этом, что, как бы ни была мала внешняя нагрузка, в окрестностях вершин трещины нормальная со-

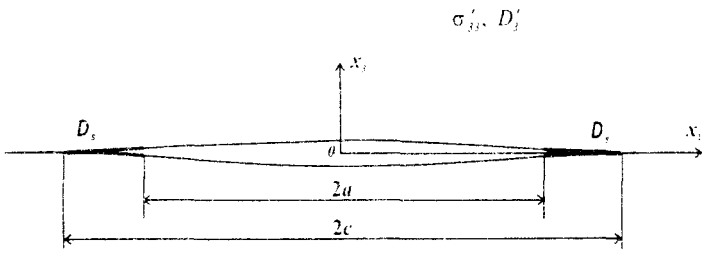


Рис. 1

© Говоруха В.Б.

Из свойства $\xi \in D(A)$ вытекают граничные условия

$$\eta(0) = \eta'(0) = 0, \tag{17}$$

а также $p = \zeta(l)$, $q = \zeta'(l)$. Два последних условия с учетом (15) могут быть записаны в виде

$$p = \tilde{\eta}(l) + \lambda\eta(l), q = \tilde{\eta}'(l) + \lambda\eta'(l). \tag{18}$$

Подстановка равенств (14), (18) в (13) дает следующие граничные условия на $\eta(x)$ при $x = l$:

$$\eta'''(l) - \frac{\lambda^2 m}{c}\eta(l) = g_{10}u + g_{11}(\tilde{\xi}), \tag{19}$$

$$\eta''(l) + \frac{\lambda^2 J}{c}\eta'(l) = g_{20}u + g_{21}(\tilde{\xi}), \tag{20}$$

где

$$g_{10} = -\frac{m}{c}\left(\frac{\gamma}{\lambda^2} + \psi(l)\right), g_{11}(\tilde{\xi}) = \frac{m}{c}\left(\frac{\gamma}{\lambda}\tilde{\phi} + \frac{\gamma}{\lambda^2}\tilde{\omega} + \lambda\tilde{\eta}(l) + \tilde{p}\right),$$

$$g_{20} = \frac{J\psi'(l)}{c}, g_{21}(\tilde{\xi}) = -\frac{J}{c}(\lambda\tilde{\eta}'(l) + \tilde{q}).$$

Таким образом, если $\eta \in H^4(0,l)$ – решение краевой задачи (16), (17), (19), (20) при заданных $\tilde{\xi} \in X$, λ, u, то формулы (14), (15), (18) определяют компоненты ϕ, ω, ζ, p, q решения $\xi \in D(A)$ уравнения (10). И наоборот, если $\xi \in D(A)$ – решение уравнения (10), то его компонента $\eta \in H^4(0,l)$ является решением краевой задачи (16), (17), (19), (20), а остальные компоненты ξ удовлетворяют соотношениям (14), (15), (18).

С помощью метода вариации постоянной найдем общее решение уравнения (16) при граничных условиях (17):

$$\eta(x) = \frac{1}{4\mu^3}\int_0^x \left(f_0(s)u + f_1(s,\tilde{\xi})\right)K(x-s)ds + C_1\eta_1(x) + C_2\eta_2(x). \tag{21}$$

Здесь введен вспомогательный параметр $\mu > 0$ и функции $K(x)$, $\eta_1(x)$, $\eta_2(x)$ по формулам

$$\mu = \left(\frac{\lambda^2\rho}{4c}\right)^{1/4}, \tag{22}$$

$$K(x) = \sin\mu x\,\mu x - \cos\mu x\,\mu x, \eta_1(x) = \sin\mu x\,\mu x, \eta_2(x) = \cos\mu x\,\mu x - e^{\mu x}\sin\mu x.$$

Поскольку $K(x)$ – гладкая функция, удовлетворяющая условиям

$$K(0) = K'(0) = K''(0) = K'''(0) = 0,$$

то j-я производная по x функции (21) может быть представлена следующим образом:

$$\eta^{(j)}(x) = \frac{1}{4\mu^3}\int_0^x \left(f_0(s)u + f_1(s,\tilde{\xi})\right)K^{(j)}(x-s)ds + C_1\eta_1^{(j)}(x) + C_2\eta_2^{(j)}(x), j = \overline{0,3}. \tag{23}$$

Для любых $\tilde{\xi} \in X$ и $\lambda > 0$ функции $f_0(\cdot)$ и $f_1(\cdot,\tilde{\xi})$ лежат в $L_2(0,l)$, поэтому из представлений (23) и уравнения (16) следует, что решение $\eta(x)$, определяемое формулой (21), лежит в $H^4(0,l)$ при любых значениях C_1, C_2, u.

Для исключения параметров C_1, C_2, u из решения $\eta(x)$ подставим выражения (23) в граничные условия (19), (20) и формулу для управления с обратной связью (5). В результате получим систему трех линейных алгебраических уравнений относительно C_1, C_2, u:

$$W\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1(\tilde{\xi}) \\ v_2(\tilde{\xi}) \\ v_3(\tilde{\xi}) \end{pmatrix}, \tag{24}$$

где компоненты матрицы $W = (w_{ij})$ и столбца свободных членов $v_i(\tilde{\xi})$ задаются следующими

дения кусочно-аналитической функции $W_3(z)$ с линией скачков $|x_1|<a$, граничные значения слева и справа которой удовлетворяют условию

$$W_3^+(x_1)+W_3^-(x_1)=iT^\infty. \tag{6}$$

где $T^\infty=\dfrac{g_{44}\sigma_{33}^\infty-g_{34}D_3^\infty}{g_{33}g_{44}-g_{34}g_{43}}$. На основе [12] решение краевой задачи (6) имеет вид

$$W_3(z)=\frac{T^\infty}{2i}\left[\frac{z}{\sqrt{z^2-a^2}}-1\right]. \tag{7}$$

Используя соотношения (1), (2) и (6), из условий (3), (4) получаем задачу сопряжения

$$W_4^+(x_1)+W_4^-(x_1)=\frac{g_{43}T^\infty-D_3^\infty}{ig_{44}},\quad |x_1|<a;$$

$$W_4^+(x_1)+W_4^-(x_1)=\frac{1}{ig_{44}}\left(D_s-D_3^\infty\right)-\frac{g_{43}T^\infty}{ig_{44}}\left[\frac{x_1}{\sqrt{x^2-a^2}}-1\right],\quad a<|x_1|<c, \tag{8}$$

в которой $W_4(z)$ – аналитическая функция на всей плоскости $(x_1,\ x_3)$ за исключением участка $|x_1|<c$ в плоскости $x_3=0$.

Решение задачи (8) имеет вид

$$W_4(z)=\frac{D_3^\infty}{2ig_{44}}\left[\frac{z}{\sqrt{z^2-c^2}}-1\right]-\frac{g_{43}}{g_{44}}W_3(z)+\frac{D_s}{ig_{44}}g_0(z), \tag{9}$$

где $g_0(z)=\dfrac{1}{\pi}\left[arcctg\left(\dfrac{a}{z}\sqrt{\dfrac{z^2-c^2}{c^2-a^2}}\right)-\dfrac{z}{\sqrt{z^2-c^2}}\arccos\left(\dfrac{a}{c}\right)\right]$.

Формулы (7), (9) позволяют определить в явном виде основные компоненты электромеханического поля в плоскости $x_3=0$. В частности, принимая во внимание, что для $|x_1|>c$ справедливо соотношение $\mathbf{W}^+(x_1)=\mathbf{W}^-(x_1)$, из уравнения (2) получаем

$$\sigma_{33}(x_1,\ 0)=\left(\sigma_{33}^\infty-\frac{g_{34}}{g_{44}}D_3^\infty\right)\frac{x_1}{\sqrt{x_1^2-a^2}}+$$

$$+\frac{g_{34}}{g_{44}}\left[D_3^\infty-\frac{2D_s}{\pi}\arccos\left(\frac{a}{c}\right)\right]\frac{x_1}{\sqrt{x_1^2-c^2}}+\frac{2g_{34}D_s}{\pi g_{44}}arcctg\left(\frac{a}{x_1}\sqrt{\frac{x_1^2-c^2}{c^2-a^2}}\right);$$

$$D_3(x_1,\ 0)=\left[D_3^\infty-\frac{2D_s}{\pi}\arccos\left(\frac{a}{c}\right)\right]\frac{x_1}{\sqrt{x_1^2-c^2}}++\frac{2D_s}{\pi}arcctg\left(\frac{a}{x_1}\sqrt{\frac{x_1^2-c^2}{c^2-a^2}}\right),\quad |x_1|>c. \tag{10}$$

Нормальная составляющая (10) вектора электрической индукции при произвольном месторасположении точки c становится неограниченной, если $x_1\to c$. Но, учитывая свойства рассматриваемой модели, она должна быть ограниченной. Поэтому положение c должно быть таким, чтобы условие конечности $D_3(x_1,\ 0)$ выполнялось при $x_1\to c$. Необходимым и достаточным условием ограниченности $D_3(x_1,\ 0)$ при $x_1\to c$, как это следует из выражения (10), является равенство нулю выражения в квадратных скобках этой формулы, что дает формулу для определения месторасположения точки c:

$$\frac{a}{c}=\cos\left(\frac{\pi D_3^\infty}{2D_s}\right). \tag{11}$$

Учитывая (11), формулы (10) преобразуем к виду:

$$\sigma_{33}(x_1,\ 0)=\left(\sigma_{33}^{\infty}-\frac{g_{34}}{g_{44}}D_3^{\infty}\right)\frac{x_1}{\sqrt{x_1^2-a^2}}+\frac{2g_{34}D_s}{\pi g_{44}}arcctg\left(\frac{a}{x_1}\sqrt{\frac{x_1^2-c^2}{c^2-a^2}}\right);$$

$$D_3(x_1,\ 0)=\frac{2D_s}{\pi}arcctg\left(\frac{a}{x_1}\sqrt{\frac{x_1^2-c^2}{c^2-a^2}}\right),\quad |x_1|>c\,. \tag{12}$$

На основе (2) для напряжений $\sigma_{33}(x_1,\ 0)$ на участке $a<|x_1|<c$ имеем

$$\sigma_{33}(x_1,0)=\frac{i(g_{33}g_{44}-g_{34}g_{43})}{g_{44}}\left[W_3^{+}(x_1)+W_3^{-}(x_1)\right]+$$

$$+\frac{g_{34}D_3^{\infty}}{g_{44}}\left[f_c^{+}(x_1)+f_c^{-}(x_1)\right]+\frac{g_{34}D_s}{g_{44}}\left[g_0^{+}(x_1)+g_0^{-}(x_1)\right],$$

где $f_c(z)=\frac{1}{2}\left[\frac{z}{\sqrt{z^2-c^2}}-1\right]$. Учитывая, что на указанном участке $f_c^{+}(x_1)+f_c^{-}(x_1)=-1$, $g_0^{+}(x_1)+g_0^{-}(x_1)=1$, $W_3^{+}(x_1)=W_3^{-}(x_1)$, для напряжений найдем

$$\sigma_{33}(x_1,\ 0)=\left(\sigma_{33}^{\infty}-\frac{g_{34}}{g_{44}}D_3^{\infty}\right)\frac{x_1}{\sqrt{x_1^2-a^2}}+\frac{g_{34}D_s}{g_{44}},\quad a<|x_1|<c\,. \tag{13}$$

Анализ формулы (13) показывает, что в окрестности вершины трещины напряжения в рамках используемой модели остаются сингулярными. Эта сингулярность носит корневой характер и характеризуется коэффициентом интенсивности напряжений (КИН) $K_1=\lim\limits_{x_1\to a+0}\sqrt{2\pi(x_1-a)}\ \sigma_{33}(x_1,\ 0)$, для которого на основании (13) получается формула

$$K_1=\sqrt{\pi a}\left(\sigma_{33}^{\infty}-\frac{g_{34}}{g_{44}}D_3^{\infty}\right). \tag{14}$$

Из соотношений (1) для скачков перемещения и электрического потенциала в плоскости трещины получаются формулы

$$\left[u_3'(x_1,0)\right]=-iT^{\infty}\left[f_a^{+}(x_1)-f_a^{-}(x_1)\right],\quad |x_1|<a$$

$$\left[\varphi'(x_1,0)\right]=\frac{D_3^{\infty}}{ig_{44}}\left[f_c^{+}(x_1)-f_c^{-}(x_1)\right]-\frac{g_{43}}{g_{44}}\left[u_3'(x_1,0)\right]+$$

$$+\frac{D_s}{ig_{44}}\left[g_0^{+}(x_1)-g_0^{-}(x_1)\right],\quad |x_1|<c, \tag{15}$$

где $f_a(z)=\frac{1}{2}\left[\frac{z}{\sqrt{z^2-a^2}}-1\right]$.

Преобразовав выражения (15) с учетом известного соотношения [8]

$$g_0^{+}(x_1)-g_0^{-}(x_1)=-\frac{2}{\pi}\arccos\left(\frac{a}{c}\right)\frac{x_1}{\sqrt{x_1^2-c^2}}-\frac{1}{2\pi i}\left[\Gamma(c,\ x_1,\ a)-\Gamma(c,\ x_1,\ -a)\right],$$

где $\Gamma(l,\ x,\ \xi)=\ln\frac{l^2-x\xi-\sqrt{(l^2-x^2)(l^2-\xi^2)}}{l^2-x\xi+\sqrt{(l^2-x^2)(l^2-\xi^2)}}$, запишем их для реальной длины зоны электрического предразрушения в следующем виде:

$$\left[u_3'(x_1,\ 0)\right] = -iT^{\infty}\frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 - a^2}}, \quad |x_1| < a;$$

$$\left[\varphi'(x_1,\ 0)\right] = -\frac{g_{43}}{g_{44}}\left[u_3'(x_1,\ 0)\right] + \frac{D_s}{2\pi g_{44}}\left[\Gamma(c,\ x_1,\ a) - \Gamma(c,\ x_1,\ -a)\right] \quad |x_1| < c. \tag{16}$$

Интегрируя последние соотношения, получаем

$$\left[u_3(x_1,\ 0)\right] = T^{\infty}\sqrt{a^2 - x_1^2}, \quad |x_1| < a;$$

$$\left[\varphi(x_1,\ 0)\right] = -\frac{g_{43}}{g_{44}}\left[u_3(x_1,\ 0)\right] +$$

$$+\frac{D_s}{2\pi g_{44}}\left[(x_1 - a)\Gamma(c,\ x_1,\ a) - (x_1 + a)\Gamma(c,\ x_1,\ -a)\right], \quad |x_1| < c. \tag{17}$$

При этом скачок электрического потенциала в вершине трещины определяется выражением

$$\delta_{\varphi} = \left[\varphi(a,\ 0)\right] = -\frac{2aD_s}{\pi g_{44}}\ln\left[\cos\left(\frac{\pi D_3^{\infty}}{2D_s}\right)\right]. \tag{18}$$

Анализ результатов численных исследований. Результаты расчетов безразмерных величин $c^* = \frac{c-a}{a}$, $K_1^* = \frac{K_1}{\sqrt{a}\sigma_{33}^{\infty}}$, $\delta_{\varphi}^* = \frac{\delta_{\varphi} e_{31}}{a c_{11}}$ для $a = 0{,}01\ м$, $\sigma_{33}^{\infty} = 1\ МПа$ и различных D_3^{∞}/D_s приведены в таблице. При этом в качестве материала тела принималась пьезокерамика PZT-4 [5], в частности c_{11} и e_{31} - это модуль упругости и пьезоэлектрическая постоянная. Как видно, величины c, K_1, δ_{φ} с ростом параметра D_3^{∞}/D_s растут нелинейным образом.

D_3^{∞}/D_s	c^*	K_1^*	$\delta_{\varphi}^* \cdot 10^{-6}$
0,2	0,05146	62,5988	2,75989
0,3	0,12233	85,0360	6,34696
0,4	0,23607	107,473	11,6560
0,5	0,41421	129,910	19,0608
0,6	0,70130	152,347	29,2255

На рис. 2 и 3 изображены графики изменения скачка электрического потенциала в интервалах $0 < x_1 < a$ и $a < x_1 < c$, соответственно. Кривые 1, 2, 3, соответствуют значениям D_3^{∞}/D_s, равным 0,2; 0,3; 0,4.

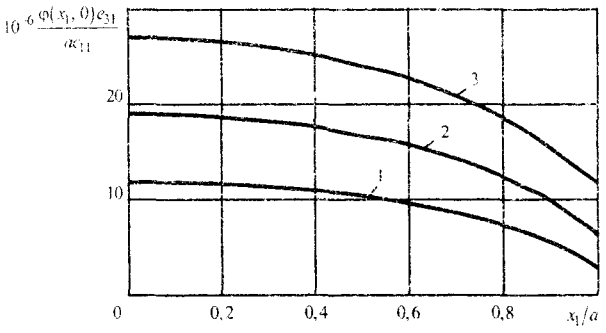


Рис. 2

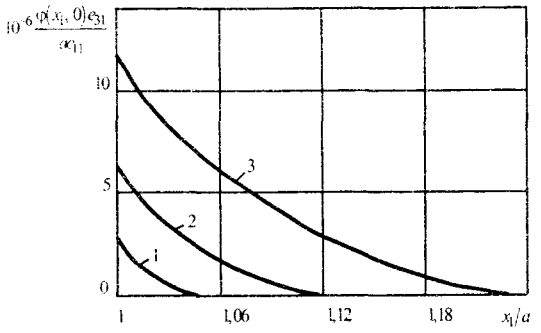


Рис. 3

Видно, что с увеличением внешней электрической нагрузки значение $\left[\varphi(x_1,0)\right]$ возрастает. Заметим, что $\left[\varphi(x_1,0)\right]$ при $x_1 = \pm a$ является ограниченной функцией, а ее производная определяется равенством (16). Согласно свойствам функции $\Gamma(l,\ x,\ \xi)$ [8], видим, что вторая производная функции $\left[\varphi(x_1,0)\right]$ при переходе через точку $x_1 = \pm a$ изменяет знак и точки $x_1 = \pm a$ являются точками перегиба. Других особых точек в интервале $0 < x_1 < c$ функция $\left[\varphi(x_1,0)\right]$, как видно из рис. 2 и 3, не имеет.

РЕЗЮМЕ

Розглянуто модель тріщини із електричними смугами передруйнування в однорідному п'єзокерамічному матеріалі. Вважаючи, що смуга електричного передруйнування локалізована на продовженні тріщини і в ній має місце лише стрибок електричного потенціалу, одержано точний аналітичний розв'язок задачі, з якого знайдено рівняння для визначення довжини цієї смуги передруйнування та коефіцієнт інтенсивності напружень. Вивчено вплив зовнішнього електричного поля на КІН та розподіл електричного потенціалу в області тріщини.

SUMMARY

The strip electric saturation model is applied to the fracture prediction of piezoelectric materials containing electrically impermeable crack. It is assumed that the electric saturation zone is localized on a line segment in front of the crack tip and the electric potential jump only arises in the strip. The exact analytical solution of the problem is found. An equation for the electric saturation zone length determination and the stress intensity factor are derived from this solution. The influence of the applied electric displacement field upon the electric potential jump and stress intensity factor are investigated.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Космодамианский А.С., Кравченко А.П., Ложкин В.Н. Действие точечного электрического заряда на границе пьезоэлектрической полуплоскости, ослабленной эллиптическим отверстием // Изв. АН АрмССР. Сер. Механика. – 1977. – Т. 30, № 1. – С. 13-20.
2. Кудрявцев Б.А., Партон В.З., Ракитин В.И. Механика разрушения пьезоэлектрических материалов. Прямолинейная туннельная трещина на границе с проводником // Прикладная математика и механика. – 1975. – Т. 39, № 1. – С.149-159.
3. Космодамианский А.С., Ложкин В.Н. Обобщенное плоское напряженное состояние тонких пьезоэлектрических пластин // Прикладная механика. – 1975. – Т. 11, № 5. – С. 45-53.
4. Калоеров С.А., Баева А.И., Глущенко Ю.А. Двумерная задача электроупругости для многосвязного пьезоэлектрического тела с полостями и плоскими трещинами // Теорет. и прикладная механика. – 2001. – Вып. 32. – С.4-79.
5. Гринченко В.Т., Улитко А.Ф., Шульга Н.А. Электроупругость. – К.: Наук. думка, 1989. – 280 с. (Механика связанных полей в элементах конструкций: В 5 т. Т. 5).
6. Партон В.З., Кудрявцев Б.А. Электроупругость пьезокерамических и электропроводных тел. – М.: Наука, 1988. – 472 с.
7. Park S., Sun C. T. Fracture criteria for piezoelectric materials // J. Am. Ceram. Soc. – 1995. – Vol. 78. – P. 1475-1480.
8. Панасюк В.В. Предельное равновесие хрупких тел с трещинами. – К.: Наук. думка, 1968. – 248 с.
9. Gao H.J., Zhang T.Y., Tong P. Local and global energy release rates for an electrically yielded crack in a piezoelectric ceramic // J. Mech. Phys. Solids. – 1997. – Vol. 45. – P. 491-510.
10. Fulton C. C., Gao H. Electrical nonlinearity in fracture of piezoelectric ceramics // Appl. Mech. Rev. 1997. Vol. 50. №11, P. 56-63.
11. Herrmann K. P., Loboda V. V., Govorukha V. B. On contact zone models for an electrically impermeable interface crack in a piezoelectric biomaterial // Int. J. Frac. – 2001. – Vol. 111. – P. 203-227.
12. Мусхелишвили Н. И. Некоторые основные задачи математической теории упругости. – М.: Наука, 1966. – 708 с.

Надійшла до редакції 15.11.2007 р.

УДК 539.3

ПРИБЛИЖЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ О ПЛОСКИХ УСТАНОВИВШИХСЯ КОЛЕБАНИЯХ ПРЯМОЛИНЕЙНО-АНИЗОТРОПНОГО ЦИЛИНДРА

В.Г.Житняя

Проблема исследования напряженно-деформированного состояния прямолинейно-анизотропных цилиндров при действии на них зависящих от времени внешних усилий изучена недостаточно. В статье [1] изложен основанный на использовании голоморфного разложения способ решения динамических задач теории упругости для конечных изотропных тел. В работе [2] рассматриваются методики построения решения краевых задач стационарной динамики анизотропного тела в двухмерных областях. В частности, с использованием рядов по функциям обобщенных комплексных переменных рассматривается решение задач об изгибных колебаниях тонкой анизотропной пластинки, для решения граничных задач внутреннего типа используются экспоненциальные решения уравнений стационарной динамики двухмерного анизотропного тела. Статья [3] содержит основанный на применении теории функций обычных комплексных переменных алгоритм приближенного решения задач об установившихся изгибных колебаниях тонких прямолинейно-анизотропных пластинок с отверстиями. Здесь аналогичным образом строится приближенный метод решения задач о плоских установившихся колебаниях прямолинейно-анизотропного цилиндра с продольными полостями.

Постановка задачи. Рассмотрим прямолинейно-анизотропный цилиндр с M продольными полостями. В каждой точке цилиндра имеется одна плоскость упругой симметрии, перпендикулярная его цилиндрической поверхности. Поперечное сечение цилиндра занимает в плоскости Ox_1x_2 область D с границей Γ. Γ объединяет внешний Γ_0 и внутренние Γ_m $\left(m=\overline{1,M}\right)$ гладкие кривые. К контурам Γ_m $\left(m=\overline{0,M}\right)$ приложены пульсирующие усилия $\sigma^0_{nlm}(x_1,x_2,t)=\mathrm{Re}\left[\sigma^0_{nlm}(x_1,x_2)\exp(-i\omega t)\right]$ $\left(l=n,k\right)$; $\bar{n}$ и $\bar{k}$ – орты внешней нормали и касательной к Γ_m. Длина цилиндра значительно больше или значительно меньше размеров его поперечного сечения.

Решение задачи об установившихся колебаниях данного цилиндра сводится к исследованию математической модели, состоящей из уравнений движения и закона Гука, уравнений малых деформаций

$$\varepsilon_{ij}=\frac{\partial_j u_i+\partial_i u_j}{2}\quad (i,j=1,2) \tag{1}$$

и граничных условий на Γ_m

$$\sigma_{nn}(x_1,x_2)=\sigma^0_{nnm}(x_1,x_2),\quad \sigma_{nk}(x_1,x_2)=\sigma^0_{nkm}(x_1,x_2). \tag{2}$$

Как и в работе [4], введем векторную функцию $\chi=(\chi_1,\chi_2,0)$, с которой проекции вектора перемещения $\bar{u}=(u_1,u_2,0)$ связаны так:

$$u_1=L_{22}\chi_1-L_{12}\chi_2,\quad u_2=L_{11}\chi_2-L_{12}\chi_1, \tag{3}$$

где

$$L_{11}=A_{11}\partial_1^2+A_{66}\partial_2^2+2A_{16}\partial_1\partial_2+\rho\omega^2 d^2,$$
$$L_{22}=A_{22}\partial_2^2+A_{66}\partial_1^2+2A_{26}\partial_1\partial_2+\rho\omega^2 d^2,$$
$$L_{12}=(A_{66}+A_{12})\partial_1\partial_2+A_{16}\partial_1^2+A_{26}\partial_2^2;$$

$\partial_i=\dfrac{\partial}{\partial\xi_i}$, $\xi_i=\dfrac{x_i}{d}$; d – характерный линейный размер области D; A_{ij} – постоянные зависящие от упругих свойств материала.

С учетом уравнений закона Гука и формул (3) уравнения движения преобразуем к такому уравнению

© Житняя В.Г.

$$L_\xi \chi_j(\xi_1,\xi_2)=0 \quad (j=1,2). \tag{4}$$

Здесь

$$L_\xi = C_{40}\partial_1^4 + C_{31}\partial_1^3\partial_2 + C_{22}\partial_1^2\partial_2^2 + C_{13}\partial_1\partial_2^3 +$$

$$+C_{04}\partial_2^4 + C_{20}\partial_1^2 + C_{11}\partial_1\partial_2 + C_{02}\partial_2^2 + a_{00};$$

$$C_{40} = A_{11}A_{66} - A_{16}^2, \quad C_{31} = 2A_{11}A_{26} - 2A_{12}A_{16},$$

$$C_{22} = A_{11}A_{22} - (A_{12})^2 + 2A_{16}A_{26} - 2A_{12}A_{66},$$

$$C_{13} = 2A_{16}A_{22} - 2A_{12}A_{26}, \quad C_{04} = A_{22}A_{66} - A_{26}^2,$$

$$C_{20} = \omega^2(A_{11} + A_{66}), \quad C_{11} = 2\omega^2(A_{16} + A_{26}),$$

$$C_{02} = \omega^2(A_{22} + A_{66}), \quad a_{00} = \omega^4, \quad \omega = \omega d\rho^{\frac{1}{2}}.$$

Построение решения. Функцию $\chi_j = v$ ищем в виде суммы

$$v = v_0 + \ldots + v_m + \ldots + v_M.$$

Вместо вещественных функций v и v_m введем в рассмотрение комплекснозначные функции

$$F = \chi_1 + i\chi_2, \quad F_m = \chi_{1m} + i\chi_{2m}, \tag{5}$$

При этом уравнение (4) в комплексных переменных

$$z_m = \xi_{1m} + i\xi_{2m}, \quad \overline{z}_m = \xi_{1m} - i\xi_{2m}, \quad z_0 = z$$

принимает вид

$$L_{z_m} F_m = 0. \tag{6}$$

Здесь

$$L_z = a_{40}\partial_z^4 + a_{31}\partial_z^3\partial_{\overline{z}} + a_{22}\partial_z^2\partial_{\overline{z}}^2 + a_{13}\partial_z\partial_{\overline{z}}^3 + a_{04}\partial_{\overline{z}}^4 +$$

$$+a_{20}\partial_z^2 + a_{11}\partial_z\partial_{\overline{z}} + a_{02}\partial_{\overline{z}}^2 + a_{00};$$

$$a_{40} = C_{40} - C_{22} + C_{04} + i(C_{31} - C_{13}) = \overline{a}_{04},$$

$$a_{31} = 4C_{40} - 4C_{04} + i(C_{31} + C_{13}) = \overline{a}_{13},$$

$$a_{22} = 6C_{40} + 2C_{22} + 6C_{04}, \quad a_{20} = C_{20} - C_{02} + iC_{11} = \overline{a}_{02},$$

$$a_{11} = 2C_{20} + 2C_{02};$$

ξ_{1m}, ξ_{2m} – локальные переменные, связанные с контуром Γ_m.

Функцию F_m представим так:

$$F_m = B_1 F_{m1} + B_2 F_{m2},$$

Здесь B_1, B_2 параметры, F_{m1} и F_{m2} – известные функции [3]. В частности, F_{m1} имеет такой вид:

$$F_{m1} = \sum_{n=0}^{N_b}\left[\overline{z}_m^n \varphi_{nm1}(z_m) + (1-\delta_{m0}) z_m^n \overline{g_{nm1}(z_m)}\right]; \tag{7}$$

$$N_b \le \infty; \quad \delta_{00} = 1, \quad \delta_{m0} = 0 \text{ при } m \ge 1.$$

В этих равенствах φ_{n0i} – функции, голоморфные во внутренней области с границей Γ_0; φ_{nmi} – функции, аналитические во внешней области с границей Γ_m при $m \ge 1$; g_{nmi} обеспечивают однознач-

ность перемещений и напряжений при обходе контура Γ_m; $i=1,2$.

С учетом уравнения (6) и представления (7) получим такую цепочку зацепляющихся дифференциальных уравнений

$$a_{40}\varphi_n^{(4)}(z)+a_{31}(n+1)\varphi_{n+1}^{(3)}(z)+a_{22}(n+1)(n+2)\varphi_{n+2}^{(2)}(z)+$$
$$+a_{13}(n+1)(n+2)(n+3)\varphi_{n+3}^{(1)}(z)+a_{04}(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)\varphi_{n+4}(z)+$$
$$+a_{20}\varphi_n^{(2)}(z)+a_{11}(n+1)\varphi_{n+1}^{(1)}(z)+a_{02}(n+1)(n+2)\varphi_{n+2}(z)+a_{00}\varphi_n(z)=0,$$
$$\varphi_n=\varphi_{nmi},\ n\geq 0.$$

Последнюю можно преобразовать к следующему виду:

$$\varphi_n(z)=q_1\frac{\varphi_{n-1}^{(1)}(z)}{n}+q_2\frac{\varphi_{n-2}(z)}{n(n-1)}+\delta_n^3 q_3\frac{\varphi_{n-3}^{(1)}(z)}{(n-2)(n-1)n}+$$
$$+\delta_n^4 q_4\varphi_{n-4}(z)/(n-3)/(n-2)/(n-1)/n+sI_z\varphi_{n-1}(z)/n+pI_z^2\varphi_{n-2}(z)/(n-1)/n+$$
$$+\delta_{n2}(-2a_{40})\varphi_0^{(2)}(z)/a_{22}/2!+\delta_{n3}(-2a_{40})\varphi_1^{(2)}(z)/a_{22}/3!, \qquad (8)$$

где при $n\geq 2$;

$$q_1=-\frac{2a_{31}}{a_{22}},\quad q_2=-\frac{2a_{20}}{a_{22}},\quad s=-\frac{a_{11}}{a_{22}},\quad p=-\frac{a_{00}}{a_{22}}$$

при $n=2,3$;

$$q_1=\frac{a_{40}a_{13}-a_{31}a_{222}}{a_{024}},\quad a_{222}=\frac{a_{22}}{2},\quad a_{024}=a_{222}^2-a_{40}a_{04};$$
$$q_2=\frac{a_{40}a_{02}-a_{20}a_{222}}{a_{024}},\quad q_3=\frac{a_{40}a_{11}}{2a_{024}};\quad q_4=\frac{a_{40}a_{00}}{2a_{024}};$$
$$s=-\frac{a_{11}a_{22}}{4a_{024}};\quad p=-\frac{a_{00}a_{22}}{4a_{024}}\quad \text{при } n\geq 4;\quad \delta_k^i=0 \text{ при } k<i,\quad \delta_k^i=1 \text{ при } k\geq i;$$

I_z – оператор, обратный оператору ∂/∂_z.

Рекуррентная формула (8) позволяет выразить любую функцию $\varphi_{nm}(z)$ через определяющую систему функций $\varphi_{lm}(z)$ $(l=0,1)$.

Частные случаи. Для ортотропного цилиндра $A_{16}=A_{26}=0$; $a_{40}=a_{04}$, $a_{31}=a_{13}$, $a_{20}=a_{02}$ – вещественные величины.

В случае изотропного цилиндра

$$a_{40}=a_{31}=a_{20}=0,\quad q_1=q_2=q_3=q_4=0.$$

При этом формула (8) принимает вид

$$\varphi_n(z)=\frac{s}{n}I_z\varphi_{n-1}(z)+\frac{p}{n(n-1)}I_z^2\varphi_{n-2}(z). \qquad (9)$$

Здесь $n\geq 2$;

$$s=-\left(\frac{\alpha^2}{4}+\frac{\beta^2}{4}\right)d^2,\quad p=-\frac{\alpha^2}{4}\cdot\frac{\beta^2}{4}d^4,\quad \alpha^2=\frac{\omega^2}{C_1^2},$$
$$\beta^2=\frac{\omega^2}{C_2^2}=2a\alpha^2,\quad a=\frac{\lambda+2\mu}{2\mu},$$

$C_1 = \sqrt{\dfrac{\lambda + 2\mu}{\rho}}$ и $C_2 = \sqrt{\dfrac{\mu}{\rho}}$ – скорости распространения волн расширения и сдвига.

Если рассматривается сплошной цилиндр, то $M = 0$, определяющая система функций имеет вид

$$\varphi_{l0i}(z) = \sum_{k=0}^{N_0} a_{kl0i} z^k \quad (l = 0,1). \tag{10}$$

С помощью формулы (8) и выражения (10) представление (7) преобразуем к следующему виду:

$$F_{01}(z,\bar{z}) = \sum_{k=1}^{N_0} \left[a_{k01} f_{k01}(z,\bar{z}) + a_{k11} f_{k03}(z,\bar{z}) \right] +$$

$$+ \sum_{k=0}^{N_0} \left[a_{k01} f_{k02}(z,\bar{z}) + a_{k11} f_{k04}(z,\bar{z}) \right]. \tag{11}$$

Здесь

$$f_{k01}(z,\bar{z}) = \sum_{n=2}^{\infty} \bar{z}^n \sum_{j=\max\left\{1, \left[\frac{n+3-k}{2}\right]\right\}}^{\left[\frac{n+1}{2}\right]} B_j^{0n} \frac{z^{k-(n+2-2j)}}{(k-(n+2-2j))!},$$

где

$$B_1^{00} = 1, \quad B_1^{01} = 0, \quad B_1^{02} = -\frac{a_{40}}{a_{222}} \frac{1}{2!}, \quad B_2^{02} = \frac{q_2}{2!}, \quad B_3^{02} = \frac{p}{2!};$$

$$B_1^{0n} = \frac{q_1}{n} B_1^{0,n-1} \quad \text{при } n \geq 3, \quad B_2^{03} = \frac{q_1}{3} B_2^{02} + \frac{s}{3} B_1^{02} + \frac{q_3}{3!},$$

$$B_3^{03} = \frac{q_1}{3} B_3^{02} + \frac{s}{3} B_2^{02}, \quad B_4^{03} = \frac{s}{3} B_3^{02}; \quad B_2^{04} = \frac{q_1}{4} B_2^{03} + \frac{q_2}{4 \cdot 3} B_1^{02} + \frac{s}{4} B_1^{03},$$

$$B_3^{04} = \frac{q_1}{4} B_3^{03} + \frac{q_2}{4 \cdot 3} B_2^{02} + \frac{q_4}{4!} + \frac{s}{4} B_2^{03} + \frac{p}{4 \cdot 3} B_1^{02},$$

$$B_n^{0n} = \frac{q_1}{n} B_n^{0n-1} + \frac{q_2}{n(n-1)} B_{n-1}^{0n-2} + \frac{s}{n} B_{n-1}^{0n-1} + \frac{p}{n(n-1)} B_{n-2}^{0n-2},$$

$$B_{n+1}^{0n} = \frac{s}{n} B_n^{0n-1} + \frac{p}{n(n-1)} B_{n-1}^{0n-2} \quad \text{при } n \geq 4;$$

$$B_2^{0.n} = \frac{q_1}{n} B_2^{0n-1} + \frac{q_2}{n(n-1)} B_1^{0n-2} + \frac{q_3}{n(n-1)(n-2)} B_1^{0n-3} + \frac{s}{n} B_1^{0n-1} \quad \text{при } n \geq 5;$$

$$B_j^{0n} = \frac{q_1}{n} B_j^{0n-1} + \frac{q_2}{n(n-1)} B_{j-1}^{0n-2} + \frac{q_3}{n(n-1)(n-2)} B_{j-1}^{0n-3} +$$

$$+ \frac{q_4}{n(n-1)(n-2)(n-3)} B_{j-2}^{0n-4} + \frac{s}{n} B_{j-1}^{0n-1} + \frac{p}{n(n-1)} B_{j-2}^{0n-2}$$

$$\text{при } n \geq 5, \ j = \overline{3, n-1}, \quad B_2^{01} = 0;$$

$$f_{k02}(z,\bar{z})=\sum_{n=0}^{\infty}\bar{z}^{n}\sum_{j=1}^{\left[\frac{n+2}{2}\right]}B^{0n}_{\left[\frac{n+1}{2}\right]+j}\frac{z^{k+(2j-2+n_1)}}{\left(k+(2j-2+n_1)\right)!},\quad n_1=n-2\left[\frac{n}{2}\right];$$

$$f_{k03}(z,\bar{z})=\sum_{n=2}^{\infty}\bar{z}^{n}\sum_{j=\max\left\{1,\left[\frac{n+2-k}{2}\right]\right\}}^{\left[\frac{n}{2}\right]}B^{1n}_{j}\frac{z^{k-(n+1-2j)}}{\left(k-(n+2-2j)\right)!},$$

где

$$B^{11}_{1}=1,\quad B^{1n}_{1}=\frac{q_1}{n}B^{1n-1}_{1}+\frac{\delta_{n3}}{3\cdot 2}\left[-\frac{a_{40}}{a_{222}}\right],\ \text{при } n\geq 2;$$

$$B^{12}_{2}=\frac{s}{2};\quad B^{13}_{2}=\frac{q_1}{3}B^{12}_{2}+\frac{q_2}{3\cdot 2}B^{11}_{1}+\frac{s}{3}B^{12}_{1},\quad B^{1n}_{n}=\frac{s}{n}B^{1,n-1}_{n-1}+\frac{p}{n(n-1)}B^{1n-2}_{n-2}\ \text{при } n\geq 3;$$

$$B^{1n}_{2}=\frac{q_1}{n}B^{1n-1}_{2}+\frac{q_2}{n(n-1)}B^{1n-2}_{1}+\frac{q_3}{n(n-1)(n-2)}B^{1n-3}_{1}+\frac{s}{n}B^{1n-1}_{1}\ \text{при } n\geq 4,$$

$$B^{1,n}_{n-1}=\frac{q_1}{n}B^{n\,n-1}_{n-1}+\frac{q_2}{n(n-1)}B^{1n-2}_{n-2}+\frac{s}{n}B^{1,n-1}_{n-2}+\frac{p}{n(n-1)}B^{1n-2}_{n-3}\ \text{при } n\geq 4;$$

$$B^{1n}_{j}=\frac{q_1}{n}B^{1n-1}_{j}+\frac{q_2}{n(n-1)}B^{1n-2}_{j-1}+\frac{q_3}{n(n-1)(n-2)}B^{1n-3}_{j-1}+\frac{q_4}{n(n-1)(n-2)(n-3)}B^{1n-4}_{j-2}+$$

$$+\frac{s}{n}B^{1n-1}_{j-1}+\frac{p}{n(n-1)}B^{1n-2}_{j-2}\ \text{при } j=\overline{3,n-2},\ n\geq 5;$$

$$f_{k04}(z,\bar{z})=\sum_{n=1}^{\infty}\bar{z}^{n}\sum_{j=1}^{\left[\frac{n+1}{2}\right]}B^{1n}_{\left[\frac{n}{2}\right]+j}\frac{z^{k+(2j-1-n_1)}}{\left(k+(2j-1-n_1)\right)!}.$$

В случае сплошного изотропного цилиндра

$$f_{k01}(z,\bar{z})=0;\quad f_{k03}(z,\bar{z})=0; \tag{12}$$

$$f_{k02}(z,\bar{z})=\sum_{n=0}^{N_B}B^{0n}_{n}\bar{z}^{n}z^{n+k},\quad B^{00}_{0}=1,\quad B^{01}_{1}=0,$$

$$B^{0n}_{n}=\frac{1}{n!}\sum_{t=1}^{\left[\frac{n}{2}\right]}C^{t-1}_{n-1-t}s^{n-2t}p^{t}\ \text{при } n\geq 2;$$

$$f_{k04}(z,\bar{z})=\sum_{n=1}^{N_b}B^{1n}_{n}\bar{z}^{n}z^{n+k-1},\quad B^{11}_{1}=1,\quad B^{1n}_{n}=\frac{1}{n!}\sum_{t=1}^{\left[\frac{n+1}{2}\right]}C^{t-1}_{n-t}s^{n+1-2t}p^{t-1}.$$

Численные результаты. Был проведен просчет для изотропного кругового цилиндра радиуса R, у которого длина значительно меньше его диаметра. Считалось, что $\frac{R}{d}=1$, $d=1$ м. На боковой поверхности цилиндра с круговой частью $\omega=\alpha\cdot C_1$ сек$^{-1}$ ($\alpha=1$ м$^{-1}$) действовали нормальные пульсирующие усилия: а) с постоянной амплитудой q; б) с амплитудой $q\cos 2Q$. В связи с этим на Γ_0 в случае а)

$\sigma_{nn} = \sigma^0_{nn0} = -q$ в случае б) $\sigma_{nn} = \sigma^0_{nn0} = -q\cos 2Q$, $\sigma_{nk} = \sigma^0_{nk0} = 0$. Для материала цилиндра принимались $E = 1{,}10^{11}$ Па; $\nu = 0{,}33$; $\rho = 8900$ кг/м^3. Вычисления проводились с использованием выражений (11) из [5]

$$F_0 = J_k(\alpha r)b_k \cos kQ,$$

где J_k – функция Бесселя 1-го рода, b_k – неизвестная постоянная; $k = 0$ в случае а) и $k = 2$ в случае б).

Результаты, полученные при использовании указанных формул, оказались весьма близкими: $\left.\frac{\sigma_{kk}}{q}\right|_{\Gamma_0} = -1{,}164$ в случае а) и $\left.\frac{\sigma_{kk}}{q}\right|_{\Gamma_0} = -1{,}13\cos 2Q$ в случае б).

Если в формуле (9) положить $\omega = 0$, то будем иметь $s = p = 0$, $\varphi_n = 0$ при $n \geq 2$. При этом для рассматриваемого цилиндра получается σ_{kk} в точках Γ_0 такое же как в случае сплошного изотропного цилиндра, сжимаемого статическим давлением.

РЕЗЮМЕ

Побудовано наближений метод, що базується на використанні теорії функцій комплексних змінних. Цей метод призначено для розв'язку задачі про плоскі сталі коливання циліндру з порожнинами.

SUMMARY

The created approximate method is based on a complex variable functions theory. The method will be utilized for the solution of a problem the plain establish vibrations of an anisotropic cylinders with the longitudinal cavities.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Александрович А.И. Исследование динамических задач теории упругости с помощью голоморфного разложения // Изв. АН СССР. Механика твердого тела. – 1979. – № 1. – С.78-82.
2. Космодамианский А.С., Сторожев В.И. Динамические задачи теории упругости для анизотропных сред. – К.: Наук. думка, 1985. – 175 с.
3. Житняя В.Г. Изгибные колебания тонкой конечной пластинки // Вісн. Донец. ун-ту. Сер. А. Природ. науки – 2002. – Вып.2. – С.145 – 150.
4. Новацкий В. Теория упругости. – М., 1975. – 872 с.
5. Гузь А.Н., Кубенко В.Д., Черевко М.А. Дифракция упругих волн. – К., 1978. – 204 с.

Надійшла до редакції 22.11.2007 р.

УДК 517.954

НЕТРИВИАЛЬНАЯ РАЗРЕШИМОСТЬ ОДНОРОДНОЙ ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ В КРУГЕ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ПОРЯДКА $2m$ В СЛУЧАЕ ХАРАКТЕРИСТИК, НЕ ИМЕЮЩИХ УГЛОВ НАКЛОНА

Е.А.Буряченко

Введение. Целью данной работы является получение критерия нетривиальной разрешимости однородной задачи Дирихле в единичном круге K для общего уравнения четного порядка $2m$, $m > 2$, хотя бы одна из характеристик которого не имеет угла наклона:

$$L(\partial_x)u = a_0 \frac{\partial^{2m}u}{\partial x_1^{2m}} + a_1 \frac{\partial^{2m}u}{\partial x_1^{2m-1}\partial x_2} + \cdots + a_{2m-1} \frac{\partial^{2m}u}{\partial x_1 \partial x_2^{2m-1}} + a_{2m} \frac{\partial^{2m}u}{\partial x_2^{2m}} = 0, \tag{1}$$

$$u\,|_{\partial K} = 0,\ u'_\nu\,|_{\partial K} = 0,\ \ldots,\ u_\nu^{(m-1)}\,|_{\partial K} = 0, \tag{2}$$

где $\vec{\nu}$ – единичный вектор внешней нормали, $\partial_x = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}\right)$ – вектор-градиент, $a_i \in C, i = 0,1,\ldots,2m$. В работе [1] был получен критерий нетривиальной разрешимости задачи (1), (2) для уравнений главного типа [2, с. 48], т.е. в случае, когда корни характеристического уравнения $L(1, \lambda) = 0$ простые и не равны $\pm i$.

Напомним [1], что *углом наклона характеристики*, отвечающей корню λ_j характеристического уравнения $L(1, \lambda) = 0$ называется некоторое решение φ_j уравнения $-tg\varphi_j = \lambda_j$, $j = 1,\ldots,2m$. Углом между i – той и j – той характеристикой назовем разность $\varphi_{ij} = \varphi_i - \varphi_j, i \neq j$.

Вопросы тривиальности ядра задачи Дирихле в так называемых исключительных случаях, когда некоторые характеристики уравнения не существуют ($\exists\, k^* : \lambda_{k^*} = \pm i$) и (или) кратны для общих уравнений второго порядка были рассмотрены А.В. Бицадзе [3] и Бурским В.П. [4], а для уравнений четвертого порядка Буряченко Е.А. [5], Товмасяном Н.Э. [6], Бабаяном А.Н. [7]. Причем в работе [5] полностью решен вопрос о получении критериев нетривиальной разрешимости задачи Дирихле и установлена зависимость между значением кратности корней характеристического уравнения и существованием нетривиального решения соответствующей задачи. В настоящей работе обобщены результаты статей [1] и [5] для общего дифференциального уравнения (1) произвольного четного порядка $2m$, $m > 2$, с постоянными комплексными коэффициентами для случая, когда существуют корни характеристического уравнения, равные $\pm i$, т.е. соответствующие им характеристики не имеют углов наклона (см. определение выше). Установлена зависимость между значением кратности корней $\pm i$ характеристического уравнения и существованием нетривиального решения задачи (1), (2) в пространстве $C^{2m}(\overline{K})$.

1. Двойственность уравнение-область. Качественные свойства решений общих граничных задач для дифференциальных уравнений в частных производных зависят от области, в которой рассматривается задача. Аналитически установить эту зависимость удалось в монографии [8, с. 199], в которой автором был разработан метод двойственности уравнение-область, позволяющий без больших технических сложностей исследовать общие граничные задачи для бестипных линейных дифференциальных уравнений произвольного порядка в полуалгебраических областях. Суть метода заключается в следующем.

Пусть $\Omega \subset R^n$ – ограниченная полуалгебраическая область, заданная неравенством $\Omega = \{x \in R^n : P(x) > 0\}$ с некоторым вещественным эллиптическим полиномом $P(x)$. Уравнение $P(x) = 0$ задает границу $\partial\Omega$. предполагается, что граница области невырождена, т.е. $|\nabla P| \neq 0$ на $\partial\Omega$. Рассмотрим следующую граничную задачу для бестипного линейного уравнения с постоянными коэффициентами порядка l:

$$L(D)u = \sum_{|\alpha| \le l} a_\alpha D^\alpha u = 0,\ u\,|_{\partial\Omega} = 0,\ u'_\nu\,|_{\partial\Omega} = 0, \ldots,\ u_\nu^{(\gamma-1)}\,|_{\partial\Omega} = 0,\ \gamma \le l. \tag{3}$$

Под двойственностью уравнение-область понимается соответствие между задачей (3) и уравнением

$$P(-D_\xi)^{l-\gamma}\{L(\xi)w(\xi)\} = 0, \tag{4}$$

отмеченное в следующем утверждении:

© Буряченко Е.А.

- интенсивность обдува плоскостей z0x и y0x в два раза меньше.

Теплофизические процессы в системе датчик – провод – стекло – окружающая среда, описываются уравнением теплопереноса:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} a \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} a \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} a \frac{\partial T}{\partial z}, \qquad (1)$$

где T – текущая температура, t – текущее время, x, y, z – текущие координаты, a – коэффициент температуропроводности, который меняется от вида материала: для стекла a_c, для датчика $a_д$ и для провода $a_п$.

Уравнение (1) дополняется системой краевых условий.

Начальные условия:

t = 0: $T_д = 120^0$C; $T_c = T_п = 20^0$.

Граничные условия:

на плоскости z0y условие отсутствия потока $\frac{\partial T}{\partial x} = 0$,

на плоскости xL_zy- также ставится это условие $\frac{\partial T}{\partial z} = 0$,

и на плоскости zL_yy – $\frac{\partial T}{\partial x} = 0$,

на плоскостях z0x, x0y и zL_xy выполняется граничное условие третьего рода, т.е: на плоскости z0x – $\lambda \frac{\partial T}{\partial y} = -\alpha / 2(T - T_{cp})$;

на плоскости x0y – $\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = -\alpha / 2(T - T_{cp})$

и на плоскости zL_xy – $\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = -\alpha (T - T_{cp})$,

где величина α определяется из условий набегающего потока по эмперической формуле $Nu = 0{,}018 Re^{0{,}8} C_L$; где C_L определяется из работы [5]. С учетом того, что отношение длины системы к ее ширине постоянна $\frac{L_j}{L_k} = 6{,}6$ – значение $C_L = 1{,}46 \Big/ \left(\frac{L_j}{L_k}\right)^{0{,}1}$, тогда определяя число Рейнольдса как $\mathrm{Re} = \frac{W L_j}{\nu_{воз}}$ получаем, что $Nu = \frac{0{,}18\,\mathrm{Re}^{0{,}8}\,1{,}46}{\left(\frac{L_j}{L_k}\right)^{0{,}1}}$, коэффициент теплообмена, в свою очередь, определяется $\alpha = \frac{Nu \lambda_{воз}}{L_j}$.

Задача реализовалась методом конечных разностей и «чехарды» [5]. Последний метод прост в применении, имеет высокую степень аппроксимации, и наиболее применим для решения пространственных задач теплопроводности. Программа выполнена на языке "Delphi 7" и сопровождается удобным для пользователя интерфейсом.

Сравнение результатов численного и лабораторного экспериментов. Для поверки адекватности модели были проведены сравнения численного и лабораторного исследования остывания ЧЭ при значении числа Re= 120.

ЧЭ нагревается до 120°C, после этого дается время на установление и нагрев отключается. С интервалом 0,5с отслеживалась его температура. Такой же процесс применялся при математическом моделировании. На рис. 2 представлены кривые охлаждения ЧЭ в эксперименте и численном моделировании.

Оба процесса имеют экспоненциальный вид, но экспериментальная кривая круче. Такое различие мы объясняем следующими причинами:

- погрешностью в геометрии датчика, задаваемой математической моделью.
- неточность задания теплофизических параметров датчика.
- не верное задание граничных условий на нижнем срезе датчика.

Вместе с тем уточнение модели даст адекватное отображение теплообменных процессов в системе сложный датчик – окружающая среда и может лечь в основу разработки общей системы расчета и оценки теплофизических и гидродинамических процессов сложных датчиков.

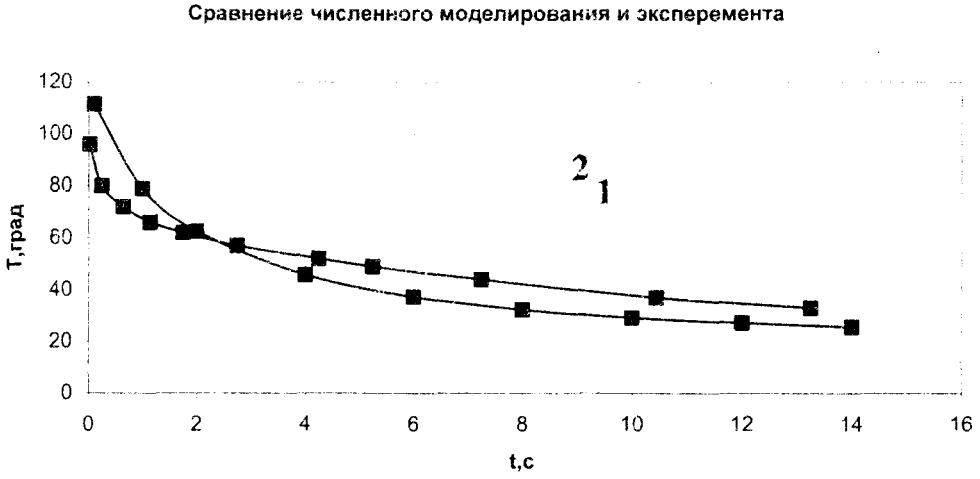


Рис 2. Сравнение экспериментальных данных (кривая 1) с результатами численного моделирования (кривая 2)

Выводы.

Сформулирована математическая модель, разработан вычислительный алгоритм, и программный продукт расчета теплофизических процессов в системе датчик – стеклянная оболочка – окружающая среда, позволяющие определить теплофизическую обстановку в системе в зависимости от скорости набегающего потока воздуха.

Сравнение результатов численного эксперимента с лабораторными исследованиями подтвердили адекватность математической модели.

РЕЗЮМЕ

Розглянуто математичну модель гідродинамічних процесів у системі складний датчик – навколишнє середовище. На основі порівняння експериментальних і розрахункових даних підтверджена адекватність математичної моделі й обчислювального алгоритму.

SUMMARY

The mathematical model of hydrodynamic processes in system a complicated transmitter – an environment is considered. On the basis of comparison of experimental and calculated data adequacy of mathematical model and computing algorithm is confirmed.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кузнецов Д.Н., Зори А.А. Исследование поля скоростей рабочего участка аэродинамической установки для градуировки датчиков. Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: Обчислювальна техніка та автоматизація. Випуск 74. – Донецьк: ДонНТУ, 2004. – С.300-305.
2. Зори А.А., Кузнецов Д.Н. Повышение эффективности градуировки первичных измерительных преобразователей термоанемометров. Наукові праці Донецького державного технічного університету. Серія: Обчислювальна техніка та автоматизація, випуск 25. – Донецьк: ДонДТУ, 2001. – С.183-189.
3. Зори А.А., Кузнецов Д.Н. Программно-аппаратные средства градуировки и отбраковки первичных измерительных преобразователей термометров и термоанемометров по температуре. Наукові праці Донецького державного технічного університету. Серія: Обчислювальна техніка та автоматизація, випуск 38. – Донецьк: РВА ДонДТУ, 2002. – С. 240-245.
4. Повх И.Л. Техническая гидродинамика. – Л.: «Машиностроение»,1969. – 524 с.
5. Затвердевание металлических композиций: производство и моделирование // В.В.Белоусов, В.А. Лейбензон, В.Ф.Недопекин и др. – Донецк ООО «Юго-Восток», ЛТД, 2005. – 231с.

Надійшла до редакції 08.10.2007 р.

УДК 532.517

ВЛИЯНИЕ ПОПЕРЕЧНОЙ КАНАВКИ НА ПОЛЕ СКОРОСТЕЙ НАД ПЛАСТИНОЙ

А.А.Воскобойник, А.В.Воскобойник, В.А.Воскобойник,
Институт гидромеханики НАН Украины, г. Киев

1. Введение

Углубления различной конфигурации и размеров часто встречаются в сооружениях и устройствах, обтекаемых либо сжимаемой, либо несжимаемой жидкостью. Наиболее широко распространенными являются каверны и впадины на корпусах подводных лодок и кораблей, гидротехнические шлюзы, оружейные фонари и колодцы шасси на самолетах, сверхзвуковые всасывающие устройства, корпуса подруливающих двигателей на космических аппаратах и в ряде других технических конструкциях. При обтекании углублений с передней кромки происходит отрыв пограничного слоя, образованного на поверхности обтекаемого тела перед углублением. За точкой отрыва образуется слой смешения между движущейся жидкостью над углублением и неподвижной в нем (в начальный момент времени). Этот слой смешения, образованный вихревыми системами, ударяется о кормовую часть углубления и частично уносится набегающим потоком за пределы углубления вниз над обтекаемой поверхностью. Другая его часть, иногда относительно большая, перемещается вглубь углубления, образуя циркуляционную зону, состоящую из одного или более крупномасштабных вихрей в зависимости от соотношения высоты углубления к его ширине и режима обтекания [1-3]. При приближении к передней стенке углубления поток жидкости циркуляционной зоны частично перемещается в виде пристеночной струи к отрывной области углубления, взаимодействуя с начальным участком слоя смешения. Остальная часть циркуляционной жидкости, обмениваясь энергией с нижней поверхностью слоя смешения, устремляется к кормовой стенке углубления, замыкая, таким образом, циркуляционную зону в виде крупномасштабной циркуляционной вихревой системы [4-6].

В области удара слоя смешения и вихревых систем, образующих его, о кормовую стенку углубления образуются значительные уровни пульсаций скорости и давления, температуры и завихренности, имеющие как линейный, так и нелинейный характер (в подавляющем большинстве случаев) [7-9]. Такие пульсационные поля создают аэрогидродинамический шум в виде акустического излучения, распространяющегося в окружающую среду со скоростью звука и псевдозвукового излучения, переносящегося со скоростью набегающего потока [10-12].

Наиболее изученными в настоящее время являются углубления квадратного или прямоугольного поперечного сечения с различными отношениями высоты к ширине [1, 12, 13]. В последнее время много работ посвящено исследованию мелких углублений цилиндрической либо сферической формы [1, 2, 4, 10, 11].

В данной работе приводятся результаты исследования влияния локального углубления в виде полуцилиндра, расположенного на обтекаемой поверхности, на кинематические характеристики пограничного слоя для различных режимов обтекания.

2. Экспериментальная установка

Ряд экспериментов по изучению особенностей формирования когерентных вихревых структур и возможности управления ими выполнена на специально созданной аэродинамической установке в виде аэродинамической трубы открытого типа [11, 14-16]. В ходе исследования проведены термоанемометрические измерения полей скоростей над обтекаемой плоской пластиной с полуцилиндрическим углублением, поперечно расположенным к направлению набегающего потока. Анализ полученных результатов дал возможность оценить характер изменения профилей продольной скорости, как над обтекаемой поверхностью плоской пластины, так и над полуцилиндрическим углублением.

Аэродинамическая труба работала на всасывание воздуха, заполняющего лабораторное помещение, и имела внутренний диаметр d_0=102 мм. Измерительный участок трубы – это прозрачная цилиндрическая вставка из оргстекла с таким же внутренним диаметром и длиной около 700 мм. Перед измерительным участком располагался входной участок длиной почти 400 мм и диаметром d_0=102 мм. Он оканчивался воздухозаборником длиной около 100 мм, спрофилированным по закону лемнискаты, чтобы обеспечить безотрывной вход воздушного потока, с достаточно равномерными профилями скоростей и давлений. В кормовой части измерительный участок соединялся с прямолинейным участком аэродинамической трубы того же диаметра и длиной, превышающей 5 ее калибров. Далее, через диффузор рабочий участок трубы подсоединялся к всасывающему патрубку центробежного вентилятора. Уровень вибраций, передаваемых от вентилятора рабочему участку, был существенно уменьшен с помощью специальных мер. Так, соединение рабочего участка с всасывающим трактом вентилятора осуществлялось

© Воскобойник А.А., Воскобойник А.В., Воскобойник В.А.

рез гладкий резиновый рукав. При монтаже аэродинамического стенда все узлы и системы устанавливались на вибродемпфирующих и виброизолирующих креплениях, амортизаторах, прокладках, в том числе и многослойных. При этом использовались как активные (динамические), так и пассивные методы подавления акустических и вибрационных помех.

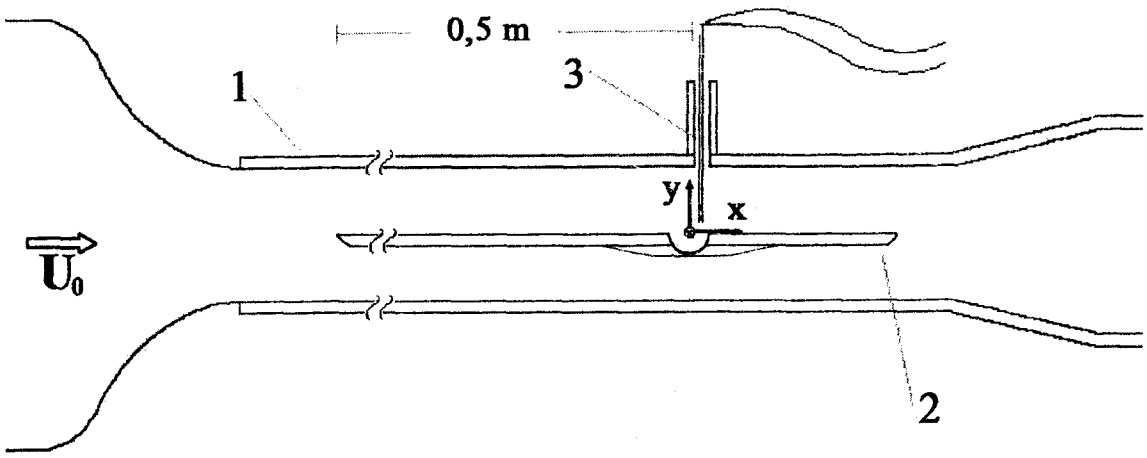


Рис. 1. Схема измерительного участка аэродинамической установки, расположения полуцилиндрического углубления на поверхности плоской пластины и используемая система координат

В осевом сечении измерительного участка аэродинамической трубы в ее горизонтальной плоскости, вдоль продольной оси монтировалась плоская гидравлически гладкая пластина (высота шероховатости ее поверхности не превышала толщины вытеснения пограничного слоя). Пластина была сделана из листового оргстекла толщиной $4 \cdot 10^{-3}$ м. Она имела ширину равную внутреннему диаметру трубы и длину $635 \cdot 10^{-3}$ м. Носовая и кормовая части пластины, для обеспечения их безотрывного обтекания, были заострены.

На обтекаемой поверхности пластины, в специально сделанной нише, устанавливался полиуретановый полуцилиндр. Он закреплялся в утопленном положении внутри прямоугольного параллелепипеда (короба), изготовленного из оргстекла. В свою очередь, короб приклеивался к нижней (нерабочей) стороне пластины (рис. 1). Продольная ось полуцилиндрического углубления располагалась на удалении $514 \cdot 10^{-3}$ м от переднего края пластины перпендикулярно скорости набегающего воздушного потока U_0. Радиус углубления составлял $R=9{,}25 \cdot 10^{-3}$ м, а глубина и длина – $11{,}5 \cdot 10^{-3}$ м и $81 \cdot 10^{-3}$ м, соответственно. Торцевые стенки углубления были плоскими и перпендикулярными к продольной оси углубления, а поверхность – гидравлически гладкой.

В верхней части прозрачного измерительного участка аэродинамической трубы (см., рис. 1) устанавливалось координатное устройство, в котором, с помощью соответствующих державок и узлов крепления, фиксировались проволочные термоанемометрические датчики фирмы Диза (Дания). Координатное устройство, оборудованное микрометрическими головками, обеспечивало линейные перемещения термоанемометрических датчиков с погрешностью $10 \cdot 10^{-6}$ м. Установка датчиков над исследуемой поверхностью, а также расположение измерительной пластины контролировались с помощью лазерного луча, который через систему зеркал и расщепителей светового луча направлялся в места установки пластины или датчика. Это позволило добиться погрешности установки указанных устройств, не превышающей $10 \cdot 10^{-6}$ м. Для уменьшения погрешности термоанемометрической аппаратуры проводились изотермические продувки воздуха в рабочем участке аэродинамической трубы при следующих параметрах на входе: t=18° С, давление – атмосферное.

В исследованиях использовались однониточные проволочные термоанемометрические датчики двух длин – $1 \cdot 10^{-3}$ и $1{,}1 \cdot 10^{-3}$ м, – при диаметре $5 \cdot 10^{-6}$ м. Соотношение длины чувствительного элемента к толщине превосходило 200. Такое соотношение рекомендуется для обеспечения равномерного теплосъема с обтекаемой поперечным потоком проволочки и уменьшения влияния токопроводящих и относительно массивных ножек датчика [17, 18]. В измерениях использовалась проволока из двух материалов – волластоновского сплава (90 % вольфрама и 10 % платины) и тугоплавкого чистого вольфрама. Проволочки приваривалась к торцам ножек термоанемометрического датчика с помощью точечной сварки.

Электрические сигналы от проволочных датчиков поступали на комплект термоанемометрической аппаратуры фирмы Диза, работающей в режиме постоянной температуры. Калибровка термоанемометрических датчиков проводилась как абсолютным, так и относительным методами. Абсолютный метод был реализован с помощью специальной калибровочной аэродинамической трубы фирмы Диза, в кото-

которой скорость воздушного потока регулировалась и контролировалась. Кроме того, калибровка проводилась на вращающемся стенде, позволяющем изменять число оборотов диска, где монтировался калибруемый датчик скорости, а также радиус установки датчика на диске. Это давало возможность изменять окружную скорость диска и линейную скорость перемещения калибруемого датчика в широких пределах. Относительный метод заключался в сопоставлении данных скорости, регистрируемой посредством калибруемого датчика, с эталонным измерителем скорости [11, 13, 16]. Для этого в измерительном участке аэродинамической трубы навстречу набегающему потоку воздуха располагались рядом калибруемый проволочный термоанемометр и трубка Пито.

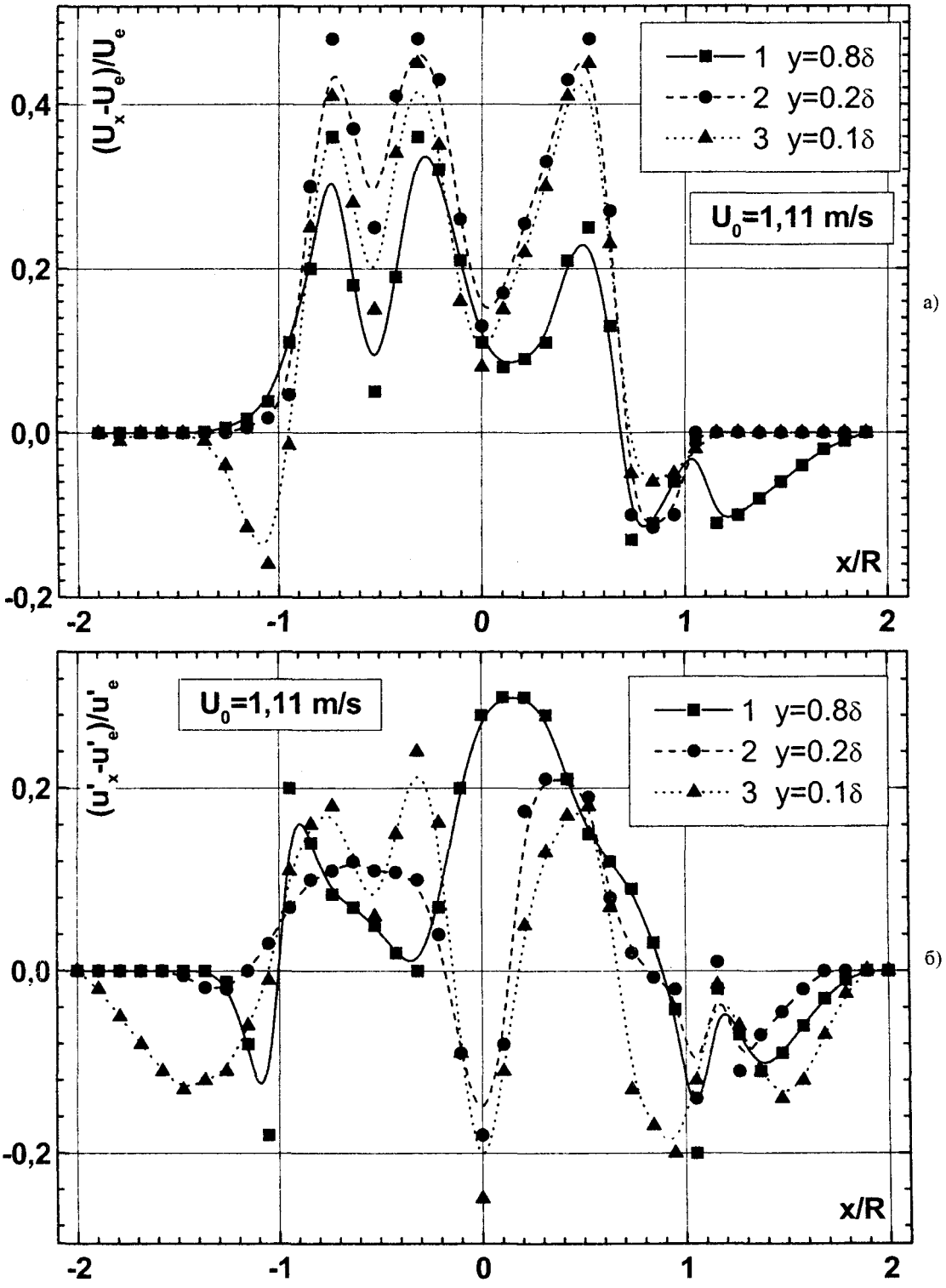


Рис. 2. Дефекты осредненных и пульсационных продольных скоростей над пластиной с углублением при U_0=1.11 м/с: а) осредненная скорость, б) – пульсационная скорость

В результате этих мероприятий удалось обеспечить приемлемые условия проведения экспериментальных исследований и достаточно высокую точность и повторяемость результатов. Это позволило проводить статистический анализ полученных данных, которые регистрировались в течение одного замера не менее минуты. Степень турбулентности набегающего потока в месте проведения исследований на пластине не превышала (3 ÷ 4) %. Уровни акустического излучения в районе углубления составляли не более 90 дБ относительно $2 \cdot 10^{-5}$ Па в диапазоне частот (20 ÷ 20000) Гц. Уровни вибраций исследуемой пластины относительно ускорения свободного падения g были -60 дБ в направлении x, -55 дБ в направлении y и -57 дБ в направлении z. Уровни вибраций самого измерительного участка аэродинамической трубы и координатного устройства не превышали -55 дБ, относительно g. Все уровни вибраций измерялись в частотном диапазоне от 2 Гц до 12,5 кГц. Погрешность измерений осредненных и интегральных величин не превышала 10 % (доверительный интервал 95 %).

3. Результаты измерений

Влияние локального поперечно обтекаемого препятствия в виде полуцилиндрической канавки на изменения осредненных и пульсационных скоростей пограничного слоя над пластиной показано на рис. 2; 3 и 4. Здесь представлены кривые дефекта скоростей для продольной составляющей скорости в виде $(U_x-U_e)/U_e$ (для средних значений U(x)) и $(\bar{u}'_x-\bar{u}'_e)/\bar{u}'_e$ (для пульсационной составляющей u'(x,t)) в зависимости от расстояния x/R вдоль пластины с выемкой, где U_e и $\bar{u}'_e$ – среднее значение продольной скорости и среднеквадратичное значение пульсаций продольной скорости в местоположении 7R выше по потоку от углубления, R – радиус канавки. Кривые 1 представляют собой данные для внешней области пограничного слоя в сечении параллельном плоскости пластины на удалении по нормали от стенки $y = 0{,}8\ \delta_{-R}$, где δ_{-R} – толщина пограничного слоя на переднем срезе углубления, т. е. x = -R. Кривые 2 – для инерционной области или для внешней границы логарифмической области $y = 0{,}2\ \delta_{-R}$, а кривые 3 – для внутренней или пристеночной области пограничного слоя $y = 0.1\ \delta_{-R}$.

При малой скорости обтекания $U_\infty = 1.11$ м/с (см. рис. 2 а) наблюдается ускорение потока над выемкой вплоть до кормовой ее части, за исключением пристеночной области, где перед углублением средняя скорость снизилась или течение затормозилось. Минимальное значение продольной скорости в этом сечении пограничного слоя наблюдается при x = -1.08 R. Практически над всей канавкой, а точнее 85 % ее площади, поток ускоряется в исследуемых сечениях пограничного слоя, причем не равномерно, а по некоторому квазигармоническому закону. В носовой части выемки обнаружено две зоны максимума ускорения при x = -0.32 R и –0.76 R, а в кормовой – одна при x = 0.5 R. Над кормовой частью канавки и непосредственно за ней до x = 1.08 R во всех трех сечениях пограничного слоя наблюдается торможение потока, а на внешней границе слоя имеется еще одна область торможения с максимумом при x = 1.2 R. В соответствии с рис. 2 а самые большие ускорения потока над углублением зарегистрированы в логарифмической области пограничного слоя ($y = 0.2\ \delta_{-R}$) и наименьшие – во внешней его области. Максимальное торможение обнаружено в передней части канавки во внутренней области пограничного слоя, а в задней части – во внешней его области.

Пульсационные составляющие продольной скорости ведут себя несколько иначе, чем средние значения, что проиллюстрировано на рис. 2 б. Перед углублением наблюдаются пониженные уровни пульсаций скорости не только в пристеночной области, но и по всему сечению пограничного слоя. Над поверхностью канавки пульсации возросли во внешней области пограничного слоя также, как и осредненные значения, с чередующимися зонами повышения и понижения пульсаций по направлению x. При этом в области отрыва пограничного слоя можно отметить высокий положительный градиент $\partial\bar{u}'/\partial x$ на внешней границе пограничного слоя. Во внутренней и логарифмической областях, подобно средним значениям скоростей (см. рис. 2 а), наблюдается положительный прирост пульсаций скорости вдоль пластины до x = 0.76 R. В районе осевого сечения углубления зарегистрированы значительные уровни (до 25 %) снижения пульсаций скорости относительно условий ненарушенного пограничного слоя. Кроме того, максимальные значения роста пульсаций скорости происходят при тех же продольных координатах, что и типовые значения ускорений средней скорости по всему сечению пограничного слоя.

В кормовой части углубления, где имеет место ударное взаимодействие набегающего потока с задней или вниз расположенной боковой поверхностью выемки, наблюдается понижение уровней пульсаций скорости, особенно для внутренней области пограничного слоя. Для внешней и инерционной области максимальное проявление этого понижения отмечается уже за пределами канавки (местоположение, где значение дефекта средней скорости равно нулю по всему сечению пограничного слоя (см. рис. 2 а)). При x = 1.19 R пульсации продольной скорости, практически, достигают значений, которые были в ненарушенном пограничном слое в местоположении x = -7 R. Далее по направлению набегающего потока наблюдается следующая и последняя волна падения пульсаций скорости за пределами полуцилиндрической выемки.

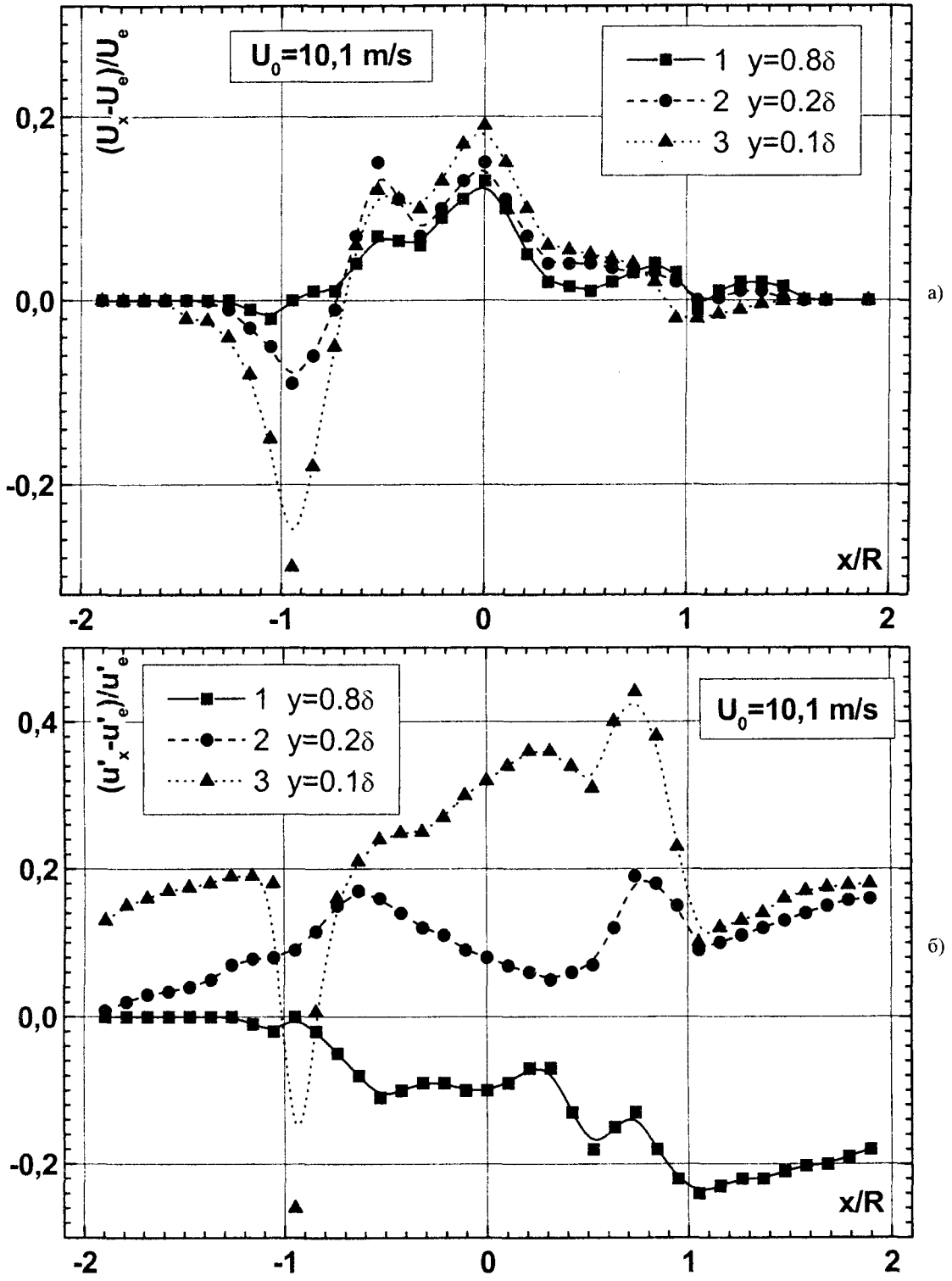


Рис. 3. Дефекты осредненных и пульсационных продольных скоростей над пластиной с углублением при U_0=10.1 м/с: а) осредненная скорость, б) – пульсационная скорость

С увеличением скорости обтекания, влияние выемки на профиль скорости несколько изменяется, хотя качественно такое же – ускорение и торможение потока, но с иными параметрами. Отметим, что амплитуды фазы ускорения при U_∞ = 10.1 м/с (рис. 3 а) значительно уменьшились и сместились ближе к кормовой части канавки, при этом наибольшие значения наблюдаются во внутренней области пограничного слоя, а максимум ускорения обнаружен при x=0, то есть, над осью полуцилиндрической выемки. Области торможения в кормовой части углубления практически нет, в пределах точности измерений, и средние значения продольной составляющей скорости во всем сечении пограничного слоя за углублением выходят на уровень ненарушенного пограничного слоя (x = -7 R). В передней части выемки, сразу же за точкой отрыва появляется резкое торможение потока (до 30 % скорости на уровне пристеночной об-

ласти и до 10 % – в логарифмической). Зона торможения во внутренней области пограничного слоя простирается от x = -1.5 R до –0.7 R, в отличие от рис. 2 а (-1.4 R; –1.0 R), т. е. охватывает почти 15 % площади над выемкой. Следует отметить, что область ускорения, представленная на рис. 2 а и 3 а, занимает, по сути дела, одну и ту же площадь над выемкой – порядка 85 %. В случае малой скорости обтекания U_0 = 1.11 м/с область ускорения смещена в носовую часть выемки, с наличием зоны торможения, главным образом, в корме. В случае U_0 = 10.1 м/с зона торможения, наоборот, сместилась в область отрыва пограничного слоя.

Для внешней области пограничного слоя (рис. 3 б) обнаружено снижение уровней пульсаций про-

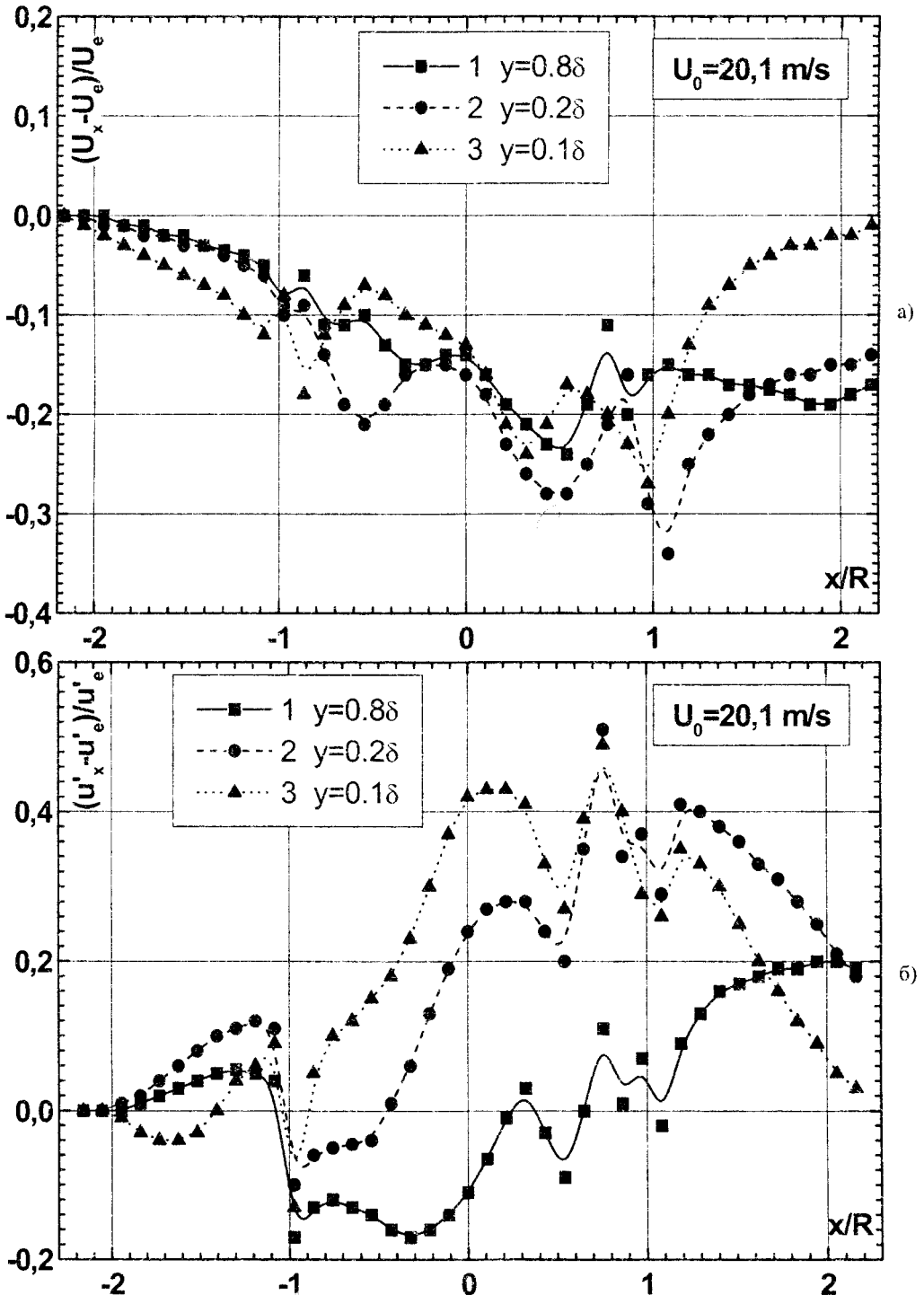


Рис. 4. Дефекты осредненных и пульсационных продольных скоростей над пластиной с углублением при U_0=20.1 м/с: а) осредненная скорость, б) – пульсационная скорость

дольной скорости с нарастающим темпом в кормовой части канавки. Максимум этого снижения проявляется в непосредственной близости к ударной стенке углубления, а именно x/R = 1.1. В отличие от режима обтекания U_∞ = 1.11 м/с (рис. 2 б), пульсации скорости в логарифмической или инерционной области пограничного слоя при всех значениях x/R, представленных на рис. 3 б, превышают соответствующие значения для ненарушенного пограничного слоя. В пристеночной области пульсации также возросли, за исключением области отрыва пограничного слоя, где пульсационная составляющая продольной скорости резко упала и снизилась на 25 % исходного состояния при x = -7 R. В остальных, исследуемых положениях по продольной координате, прирост пульсаций скорости во внутренней области пограничного слоя оказывается наибольшим и своего максимума в 45 % достигает при x = 0.76 R. Кстати, здесь же наблюдаются локальные экстремумы пульсаций продольной скорости и для остальных двух сечений пограничного слоя, представленных на рис. 3 б.

При дальнейшем возрастании скорости обтекания до 20 м/с (см. рис. 4), можно отметить повсеместное, в смысле по всей толщине пограничного слоя, торможение набегающего потока, которое проявляется уже на расстоянии, превышающем радиус канавки перед ее передним краем (рис. 4 а). При прохождении над поверхностью углубления, продольные средние скорости постепенно убывают с чередующимися характерными зонами торможения и ускорения потока. Наибольшее торможение над углублением оторвавшийся пограничный слой испытывает в сечении x≈0.5R по всей своей толщине, особенно на уровне логарифмической области, т. е. $y=0.2\delta_R$. В непосредственной близости к ударной стенке канавки наблюдается ускорение потока, а затем его торможение у задней стенки, а для сечения $y=0.2\delta_R$ область торможения простирается и за ударный край углубления. Далее в следе канавки, в пограничном слое исследуемой пластины, наблюдается ускорение потока, главным образом, в его внутренней области.

Поле пульсаций продольной скорости при U_∞=20.1 м/с имеет свои особенности поведения, в отличие от средней продольной скорости и пульсационных составляющих, которые получены при более низких скоростях набегающего потока. Перед углублением уровни пульсаций скорости во внешней части пограничного слоя возрастают, а в пристеночной – сначала понижаются, а затем также растут (см. рис. 4 б). За точкой отрыва пограничного слоя пульсации скорости по всей толщине пограничного слоя резко убывают, а затем в пристеночной и логарифмической областях вновь нарастают. Во внешней же части пограничного слоя пульсации скорости уменьшаются почти до центра углубления, а потом растут по квазигармоническому закону. Нарастание пульсаций скорости в этом сечении пограничного слоя прослеживается и в область следа углубления, вплоть до x/R≈2. В пристеночной и логарифмической областях пограничного слоя зоны торможения и ускорения потока близки по своему местоположению и кривые 2 и 3 на рис. 4 б имеют подобный характер поведения. Максимум пульсаций скорости в этих областях зарегистрирован вблизи ударной стенки, а именно, при x=0.75R. В области более удаленной от углубления поле пульсаций продольных скоростей монотонно убывает во внутренней части пограничного слоя, приближаясь к значениям ненарушенного пограничного слоя.

4. Выводы

На основании экспериментального изучения влияния локального углубления на поле скоростей пограничного слоя над пластиной с полуцилиндрической канавкой, можно сделать следующие выводы.

1. Установлено, что в пограничном слое над плоской пластиной с поперечно обтекаемой полуцилиндрической канавкой наблюдаются чередующиеся области увеличения и уменьшения осредненной и пульсационной скорости.

2. Обнаружено, что при ламинарном режиме обтекания поток над углублением ускоряется, а позади углубления тормозится. Наряду с этим, торможение потока наблюдается только в пристеночной области пограничного слоя перед поперечно обтекаемой полуцилиндрической канавкой.

3. Найдено, что с ростом скорости обтекания поток тормозится с нарастающим темпом. При турбулентном режиме обтекания области торможения наблюдаются как над углублением, так и позади него по всей толщине пограничного слоя.

4. Зарегистрировано, что значения пульсационных составляющих продольной скорости возрастают в пристеночной и логарифмической областях пограничного слоя при переходе к турбулентному режиму обтекания. При этом они убывают во внешней области пограничного слоя (особенно с приближением к кормовой части углубления).

РЕЗЮМЕ

В аеродинамічній трубі відкритого типу проведені термоанемометричні вимірювання поля швидкостей над пластиною з локальним заглибленням. Дослідження виконані для ламінарного та турбулентного режимів обтікання у діапазоні чисел Рейнольдса по довжині пластини (від її початку до місцезнаходження заглиблення) $4\cdot10^4\div7\cdot10^5$. Наведено дефекти осередненої та пульсаційної складових повздовжньої швидкості вздовж пластини та над заглиб-

ленням. Показано, що напівциліндричне заглиблення на пласкій поверхні, яке обтікається поперечним потоком, викликає зміни у структурі пограничного шару, створюючи зони прискорення та гальмування потоку над пластиною. При збільшенні швидкості обтікання значення пульсаційних складових поздовжньої швидкості зростають у пристінній та логарифмічній областях пограничного шару, а осереднена повздовжня швидкість зменшується, як над заглибленням, так і поблизу нього по всій товщині пограничного шару.

SUMMARY

The hot-wire anemometry measurements of the velocity fields above the plate with local trench are carried out in open wind tunnel. The investigations are held for laminar and turbulent flows in the range of the Reynolds numbers with respect to plate length (from its nose to the cavity site) $4 \cdot 10^4 \div 7 \cdot 10^5$. The defects of mean and fluctuational streamwise velocity components along the plate and above the cavity are presented. It is shown that the cross-streamlined half-cylindrical cavity on the flat surface changes the boundary layer structure, forming the stream braking and acceleration zones above of the plate. The streamlined velocity fluctuations are increased into near-wall and logarithmic regions of the boundary-layer with the increase of the flow velocity and mean streamwise velocities are decreased both above the cavity and vicinity of the cavity.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Isaev S. A., Leont'ev A. I., Kiknadze G. I., Kudryavtsev N. A., Gachechiladze I. A. Comparative analysis of the vortex heat exchange in turbulent flows around spherical hole and a two-dimensional trench on a plane wall // J. Eng. Phys. Thermophysics. – 2005. – 78, № 4. – P. 749-761.
2. Управление обтеканием тел с вихревыми ячейками в приложении к летательным аппаратам интегральной компоновки / Под ред. А. В. Ермишина, С. А. Исаева. – М., СПб., 2001. – 360 с.
3. Rockwell D. Vortex-body interactions // Annu. Rev. Fluid Mech. – 1998. – 30. – P. 199-229.
4. Халатов А. А. Теплообмен и гидродинамика около поверхностных углублений (лунок). – К.: ИТТФ НАН Украины, 2005. – 76 с.
5. Larcheveque L., Sagaut P., Labb O. Large-eddy simulation of a subsonic cavity flow including asymmetric three-dimensional effects // J. Fluid Mech. – 2007. – 577. – P. 105–126.
6. Chang K., Constantinescu G., Park S.-O. Analysis of the flow and mass transfer processes for the incompressible flow past an open cavity with a laminar and a fully turbulent incoming boundary layer // J. Fluid Mech. – 2006. – 561. – P.113-145.
7. Bres G., Colonius T. Three-dimensional linear stability analysis of cavity flows // AIAA Pap. 2007-1126. – 2007. – 16 p.
8. Colonius T. An overview of simulation, modeling and active control of flow/acoustic resonance in open cavities // AIAA Pap. 2001-0076. – 2001. – 12 p.
9. Kegerise M.A., Spina E.F., Garg S., Cattafesta III L. N. Mode-switching and nonlinear effects in compressible flow over a cavity // Phys. Fluids. – 2004. – 16, № 3. – P. 678-687.
10. Oshkai P., Rockwell D., Pollack M. Shallow cavity flow tones: transformation from large- to small-scale modes // J. Sound Vibr. – 2005. – 280. – P. 777-813.
11. Бабенко В.В., Воскобойник А.В., Воскобойник В.А., Турик В.Н. Вихреобразование в полусферической лунке на поверхности обтекаемой пластины // Тезисы V Междун. Конф. Проблемы промышленной теплотехники. – Киев: ИТТФ НАНУ, 2007. – С. 29-30.
12. Rowley C. W., Colonius T., Basu A. On self-sustained oscillations in two-dimensional compressible flow over rectangular cavities // J. Fluid Mech. – 2002. – 455. – P. 315–346.
13. Pereira J. C. F., Sousa J. M. M. Experimental and numerical investigations in a rectangular cavity // J. Fluids Eng. – 1995. – 117. – P. 68-74.
14. Воскобійник В. А., Воскобійник А. В. Статистичні характеристики вихрових систем у напівциліндричному заглибленні на обтічній поверхні // Гідроакустичний журнал. – 2006. – № 3. – С. 57-65.
15. Турик В.Н., Бабенко В.В., Воскобойник В.А., Воскобойник А.В. Вихревое движение в полусферической лунке на поверхности обтекаемой пластины // Вестник НТУУ "КПИ": Машиностроение. – 2006. – № 48. – С. 79-85.
16. Воскобійник А. В., Воскобійник В. А. Напівсферичне заглиблення – генератор вихорів на пласкій обтічній поверхні // Проблеми водопостачання, водовідведення та гідравліки. – 2007. – Вип. 8. – С. 151-161.
17. Алемасов В. Е., Глебов Г. А., Козлов А. П. Термоанемометрические методы исследования отрывных течений. – Казань: Казанский филиал АН СССР, 1990. – 178 с.
18. Rowley C. W., Williams D. R. Control of forced and self-sustained oscillations in the flow past a cavity // AIAA Pap. 2003-0008. – 2003. – 8 p.

Надійшла до редакції 08.10.2007 р.

УДК 532.517

АНАЛИЗ ДИНАМИКИ ДВИЖЕНИЯ НАНОСОВ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ВЕТРОВОГО ВОЛНЕНИЯ

А.Г.Марченко, Л.Н.Терещенко,
Институт гидромеханики НАН Украины, г. Киев

Изучение рек и морей является одним из приоритетных направлений развития современной науки. Рассмотрение существующей литературы по транспорту наносов свидетельствует о том, что эта проблема является одной из ведущих в гидравлике открытых потоков. Поэтому одной из важных задач является исследование транспорта наносов, обусловленного различными видами волновых и квазистационарных движений водных масс в мелководной зоне и имеет большое значение при решении широкого круга вопросов динамики шельфовых зон морей и океанов. При расчетах перемещения наносов, необходимо учитывать нестационарность турбулентных потоков и формирование в этих условиях дополнительных тангенциальных напряжений, возникающих на деформируемом подводном склоне под действием влекущего напряжения ветра на свободной поверхности и ветрового волнения. Особенно важны количественные оценки этого процесса.

Известно, что движение донных наносов осуществляется преимущественно в виде гряд. Высота и скорость перемещения гряд определяют сопротивление потока и глубинные деформации. Движение наносов является одним из важных факторов, влияющих как на строительство, так и на эксплуатацию портов. Движение наносов непосредственно связано с явлением переформирования берегов течениями. Речной поток всегда несет какое-то количество взвешенных и влекомых донных наносов. Всякое вмешательство в жизнь реки при строительстве приводит к изменению режима движения воды и наносов, с образованием в одних местах зон с более высокими скоростями движения, а в других – зон с пониженными скоростями. Соответственно в первом случае возможен размыв, а во втором неизбежно отложение наносов. По длине реки в верхней ее части в общем преобладает явление размыва и насыщения потока наносами, в нижней, с падением уклонов и скоростей течения, более характерно выпадение наносов. Процесс выпадения наносов наиболее интенсивен в устьях рек. При впадении реки в залив резко уменьшаются скорости течения, что сопровождается осаждением взвешенных и донных частиц. В результате такого осаждения наносов перед устьем реки образуется обширное мелководье, называемое устьевым баром. С течением времени мели поднимаются, образуя острова; речные воды, стремясь к морю, промывают в них протоки, создавая многочисленные разветвления. Образуется обширное пространство треугольной формы в плане, состоящее из многочисленных островов, рукавов, боковых проток, отделившихся озер. Такие устья называются дельтами и занимают обширные площади в несколько тысяч квадратных километров.

Интенсивность освоения морских берегов диктует повышенные требования к расчету гидродинамики прибрежной зоны, а также транспортирующей и эрозионно-аккумулятивной способности водных потоков в широких диапазонах изменения природных условий. При этом большая роль в решении поставленной задачи отводится вопросам математического моделирования динамических процессов, протекающих в этой наиболее динамически активной части открытых водоемов. Исследования береговой зоны подошли вплотную к проблеме расчета деформаций донного рельефа в заданных гидравлических условиях, для успешного решения которой возникает необходимость расчета удельных расходов наносов под действием заданного поля течений. Важным требованием к расчетной методике является возможность использования при неустановившемся режиме, возникающем под действием наиболее значимого и распространенного в береговой зоне гидродинамического фактора – ветрового волнения. Различные режимы последнего вне зоны обрушения волн в прибойной зоне предполагают необходимость внесения в расчетные методики универсальности. В зонах трансформации и обрушения ветровых волн в ряде случаев могут наблюдаться значительные течения, индуцируемые тангенциальным напряжением ветра на свободной поверхности и волновыми радиационными напряжениями, учет которых при расчете транспорта наносов в значительной мере предопределяет точность методики расчета.

Для определения транспорта наносов существует большое количество расчетных методик, которые не учитывают влияние нестационарных процессов и формирующихся придонных тангенциальных напряжений. В данной работе используется методика расчета, которая базируются на результатах аналитических и численных методов исследований, подтверждены многочисленными лабораторными и натурными данными [1...8].

Многообразие народнохозяйственных задач диктует необходимость прогноза отдельных составляющих обломочного материала- удельного расхода донных и взвешенных наносов. Данная методика расчета транспорта донных и взвешенных наносов распространяется на достаточно широкий диапазон

© Марченко А.Г., Терещенко Л.Н.

изменения гидравлических условий в прибрежной зоне штормового моря и может быть использована при расчете транспортирующей и эрозионно-аккумулятивной способности нестационарных турбулентных потоков, формирующихся в береговой зоне водоемов в штормовые периоды. В основу предлагаемой методики положен учет формирования дополнительных тангенциальных напряжений, возникающих на деформируемом дне в условиях его рифельного строения под действием влекущего напряжения ветра на свободной поверхности и ветрового волнения. Эти расчеты выполняются для несвязанных донных грунтов. В основе метода расчета лежит разделение транспортируемых водным потоком наносов на донные и взвешенные, сумма удельных расходов которых отвечает суммарному транспорту наносов.

Транспортирующая способность водных потоков в данной работе рассчитывается в нестационарных гидравлических условиях и заключается в следующем:

В качестве исходной используется линейная теория волн малой амплитуды.

Определение динамических параметров ветрового волнения. Максимальное значение придонного волнового потока:

$$U_m = \frac{h_b \pi}{\tau_0 sh(2\pi h_0)\lambda} \tag{1}$$

$$\alpha = \frac{\tau_0 U_m}{2\pi}, \text{ где} \tag{2}$$

h_b – высота волны; λ – длина волны; τ_0 – период; h_0 – локальная глубина потока.

Расчет параметров донных форм

$$U_{mm} = \frac{0,4U_m}{\ln(0,64\alpha_1(d_{cp}+1))}, \tag{3}$$

где d_{cp} – средний диаметр донных наносов.

Высота и длина донных рифелей:

$$F_0 = \frac{U_m^2}{gd_{cp}(s-1)}; \quad F_1 = 0,54\frac{2\alpha}{d_{cp}^{2/3}}, \text{ где}$$

g – ускорение свободного падения

$$\Delta = 0,37U_{mm} \text{ при } F_0 < F_1; \ \Delta = 0 \text{ при } F_0 \geq F_1; \ L = 1,83U_{mm}\tau_0 \tag{4}$$

Далее по методике определяются тангенциальные напряжения [1].

Определение максимального значения динамической скорости при рифельной шероховатости:

$$U_{mp} = \frac{0,4U_m}{\ln\left(1,6\frac{a_\delta}{2,5d_{cp}+\Delta}+1\right)}, \text{ где} \tag{5}$$

a_δ – амплитуда частиц жидкости у дна в волновом потоке.

Определение толщины нестационарного турбулентного пограничного слоя при зернистой шероховатости:

$$\delta = 0,037U_{mm}\tau_0 \tag{6}$$

Расчет стационарной составляющей волновых тангенциальных напряжений:

$$\bar{U}_{mb}^2 = 0,086\frac{U_m^2 U_{mm}\tau_0}{\lambda} + 0,15U_{mm}^2\frac{\Delta^2}{L\delta}; \quad \bar{U}_{mbx}^2 = \bar{U}_{mb}^2\cos\alpha; \quad \bar{U}_{mbe}^2 = \bar{U}_{mb}^2\sin\alpha \tag{7}$$

Расчет параметров трения для зернистой и рифельной шероховатостей:

$$C'/\sqrt{g} = 2,5\ln\left(\frac{4h_0}{d_{cp}}+1\right); \quad C/\sqrt{g} = 1,88\ln\left(\frac{4h_0}{d_{cp}}+1\right), \text{где} \tag{8}$$

C' и C – соответственно коэффициенты Шези при зернистой и рифельной шероховатости.

Расчет тангенциальных напряжений для осредненных по глубине и периоду ветровых волн течений

$$\bar{U}_{mtx}^2 = \frac{g}{C'^2}u\sqrt{u^2+v^2}; \quad \bar{U}_{mty}^2 = \frac{g}{C'^2}v\sqrt{u^2+v^2}; \quad \bar{U}_{m0x}'^2 = \sqrt{\bar{U}_{mbx}^4 + \bar{U}_{mtx}^4};$$

$$\bar{U}_{m0y}'^2 = \sqrt{\bar{U}_{mby}^4 + \bar{U}_{mty}^4}; \quad \bar{U}_{m0}'^2 = \sqrt{\bar{U}_{m0x}'^4 + \bar{U}_{m0y}'^4} \tag{9}$$

Расчет транспорта донных наносов
Определение параметра частиц

$$D_m = d_{cp}\left(\frac{g(s-1)}{\nu^2}\right)^{1/3}, \text{ где} \qquad (10)$$

ν – коэффициент кинематической молекулярной вязкости; s – относительная плотность данного грунта.
Для расчета критического тангенциального напряжений нужно рассчитать $\theta_{кр}$ выбираем из условия:

$D_m \le 4$ $\quad \theta_{kp} = 0,24(D_m)^{-1}$; $\quad 4 < D_m \le 10$ $\quad \theta_{kp} = 0,14(D_m)^{-0,64}$;

$10 < D_m \le 20$ $\quad \theta_{kp} = 0,04(D_m)^{-0,1}$; $\quad 20 < D_m \le 150$ $\quad \theta_{kp} = 0,013(D_m)^{0,29}$;

$D_m > 150$ $\quad \theta_{kp} = 0,055$;

$$U_{mkp} = gd_{cp}(s-1)\theta_{кр} \qquad (11)$$

Расчет параметров β_1 и β_2

$$\beta_1 = \frac{U_{kp}^2 - \bar{U}_{mo}'^2}{U_{mp}^2}; \qquad \beta_2 = \frac{U_{kp}^2 + \bar{U}_{mo}'^2}{U_{mp}^2} \qquad (12)$$

Расчет эффективного тангенциального напряжения $U_{m\,эф}$ производится согласно [1]:

Если $\beta_1 < 1$, $\quad \beta_2 < 1$

$$U_{mэф}^2 = \frac{U_{mp}^2}{\pi}\left(\sqrt{1-\beta_1^2} - \sqrt{1-\beta_2^2} - \beta_1 \arccos\beta_1 + \beta_2 \arccos\beta_2\right)$$

Если $|\beta_1| < 1$, $\quad \beta_2 \ge 1$

$$U_{mэф}^2 = \frac{U_{mp}^2}{\pi}\left(\sqrt{1-\beta_1^2} - \beta_1 \arccos\beta_1\right)$$

Если $\beta_1 \ge 1$

$$U_{mэф}^2 = 0$$

Если $\beta_1 \le -1$

$$U_{mэф}^2 = \bar{U}_{m0}'^2 - U_{mkp}^2 \qquad (13)$$

Расчет удельного расхода донных наносов:

$$q_1 = 0,053\sqrt{gd_{cp}(s-1)}\,\frac{d_{cp}}{D_m^{0,3}}\left(\frac{U_{mэф}^2}{U_{mкр}^2}\right)^{2,1} \qquad (14)$$

Для расчета взвешенных наносов находим неизвестные параметры из [1] и определяем по формуле:

$$q_2 = Fh_0C_a\sqrt{u^2 - v^2}, \text{ где} \qquad (10)$$

C_a-придонная концентрация наносов; F – параметр; u, v – соответственно составляющие скорости течения вдоль оси x и y.

Для решения широкого круга вопросов динамики шельфовых зон морей имеет большое значение исследование транспорта наносов, обусловленного различными видами волновых воздействий и течений водных масс. Существует, по крайней мере, два подхода к изучению массовых перемещений наносов в море под суммарным воздействием волн и волновых течений: исследование итоговых результатов перемещения наносов и переформирования рельефа за большие периоды времени и изучение кратковременных подвижек материала и обусловленного ими изменений рельефа. Если в первом случае исследователи оперируют условными обобщенными представлениями, то во втором случае предпринимаются попытки увязать процесс массового перемещения наносов с реальными физическими величинами и вызывающими его факторами.

В данной работе приведены результаты численных расчетов по формулам (1)...(10) при изменении различных исходных параметров (глубины водоема, высоты волны и крупности донных наносов). Расчеты приведенные в табл.1 выполнены для условий: $\lambda_0 = 12$; $\quad u = v = 0$; $\quad d_{cp} = 0,1мм$; $\quad S = 2,65т/м^3$.

Как видно из данных табл.1 с увеличением глубины при одинаковой высоте волны расход донных и взвешенных наносов уменьшается. Причем удельный расход донных наносов намного меньше удельного расхода взвешенных наносов. С увеличением высоты волны расход наносов возрастает.

В расчетах приведенных в табл.2 исходные параметры были равны: $\lambda_0 = 12$; $u = 0; v = 1$ м/с; $d_{cp} = 0,16мм$; $S = 2,65т/м^3$. Также в табл. 2 приведен суммарный транспорт наносов q_Σ и в направлений осей х q_x и у q_y для различных глубин и высот волн. Отсутствие данных в таблицах указывает на «нечувствительность» метода к расчету составляющих транспорта наносов в указанных условиях. Как видно из табл.2 при высоте волны до 0,3м при данном методе расчетов удельный расход наносов не определяется. Также так как в для расчетов табл.2 скорость течения в направлении оси у не равняется нулю, поэтому в этом направлении расход наносов на два порядка выше чем в направлении оси х. Это подтверждает существенное влияние скорости течения на удельный расход наносов.

На рис.1 представлен объем суммарного волнового транспорта наносов ($м^2/с$) на различных глубинах при скорости течения 1 м/с: 1...7 – соответственно высоты волн 0,3...0,9 м; I – область разрушенной волны. Как видно из рисунка с увеличением глубины для всех высот волн суммарный транспорт наносов уменьшается и стремится к нулю. Также с увеличением высоты волны объем транспорта наносов увеличивается и носит параболический характер.

Таблица 1

h_0, м	h_b, м	h_b / h_0	h_b^2 / h_0,м	$q_1 \times 10^3$,$м^2/с$	$q_2 \times 10^3$,$м^2/с$
1	0,35	0,35	0,1225	0,000028	0,089
	0,50	0,50	0,250	0,00115	0,570
2	1	0,50	0,500	0,00426	2,480
3	1	0,333	0,333	0,00005	1,326
	1,5	0,500	0,750	0,0097	8,200
	2	0,666	0,333	0,1450	36,510
5	1	0,2	0,2000	-	0,354
	2	0,40	0,800	-	10,69
	3	0,60	1,800	-	70,81
	4	0,80	3,200	-	240,7
8	1	0,125	0,ё125	-	0,032
	2	0,250	0,500	-	2,50
	3	0,375	1,125	0,0032	21,77
	4	0,500	2,000	0,0603	110,00

Таблица 2

h_0, м	h_b, м	q_2,$м^2/с$	q_1,$м^2/с$	$q_x, м^2/с$	$q_y, м^2/с$	$q_\Sigma, м^2/с$
2,0	0,2	-	-	-	-	-
	0,3	-	-	-	-	-
	0,4	$1,4 \cdot 10^{-5}$	$2,4 \cdot 10^{-5}$	$0,2 \cdot 10^{-7}$	$2,7 \cdot 10^{-5}$	$2,7 \cdot 10^{-5}$
	0,5	$49 \cdot 10^{-5}$	$2,4 \cdot 10^{-5}$	$0,11 \cdot 10^{-6}$	$49 \cdot 10^{-5}$	$49 \cdot 10^{-5}$
3,0	0,5*	-	-	-	-	-
	0,6	$8 \cdot 10^{-5}$	$1,9 \cdot 10^{-5}$	$0,26 \cdot 10^{-7}$	$9,1 \cdot 10^{-5}$	$9,2 \cdot 10^{-5}$
	0,7	$66 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-5}$	$0,9 \cdot 10^{-7}$	$67 \cdot 10^{-5}$	$67 \cdot 10^{-5}$
3,5	0,5*	-	-	-	-	-
4,0	0,7	$0,2 \cdot 10^{-5}$	$1,7 \cdot 10^{-5}$	$0,9 \cdot 10^{-8}$	$1,2 \cdot 10^{-5}$	$1,2 \cdot 10^{-5}$
	0,8	$22 \cdot 10^{-5}$	$1,8 \cdot 10^{-5}$	$0,3 \cdot 10^{-6}$	$23 \cdot 10^{-5}$	$23 \cdot 10^{-5}$
5,0	0,8	$44 \cdot 10^{-5}$	$1,6 \cdot 10^{-5}$	$0,35 \cdot 10^{-7}$	$45 \cdot 10^{-5}$	$45 \cdot 10^{-5}$
6,0	0,7*	-	-	-	-	-
	0,8*	-	-	-	-	-
	0,9	$0,2 \cdot 10^{-5}$	$1,49 \cdot 10^{-5}$	$0,6 \cdot 10^{-7}$	$0,88 \cdot 10^{-5}$	$0,9 \cdot 10^{-5}$
	1,3	$152 \cdot 10^{-5}$	$1,7 \cdot 10^{-5}$	$0,9 \cdot 10^{-7}$	$153 \cdot 10^{-5}$	$153 \cdot 10^{-5}$
7,0	1,2	$3,5 \cdot 10^{-5}$	$1,4 \cdot 10^{-5}$	$0,11 \cdot 10^{-7}$	$4,4 \cdot 10^{-5}$	$4,4 \cdot 10^{-5}$

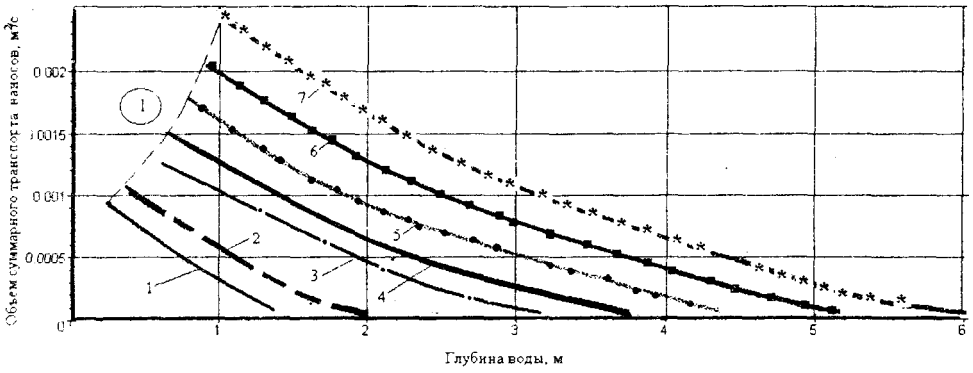


Рис.1

В результате проведенных расчетов определены:
1) расход взвешенных и донных наносов для различных диаметров обломочного материала при изменении высоты волны от (0,2 до 4 м) на различных глубинах водоема (от 1 до 8 м);
2) определено влияние исходных параметров на транспорт наносов в направлении оси х и у и для данных условий получено, что в направлении оси у удельный расход наносов на два порядка выше чем в направлении оси х, что обусловлено скоростью течения;
3) также определены границы чувствительности данного метода расчета и найдена область, где данный метод не работает, также определена область разрушенной волны;
4) определено влияние скорости течения на удельный расход наносов и также влияние направления скорости течения на суммарный расход наносов;
5) получено распределение объема транспорта суммарных наносов для различных исходных условий.

РЕЗЮМЕ

Виконано чисельні розрахунки динаміки транспорту наносів та визначено границю чутливості методу. Так *при великій глибині і малій висоті хвилі метод не працює.* Та для висоти хвилі менше 0,3 м. Визначено внесок кожного типу наносів в загальну суму транспорту. Визначено, що із збільшенням глибини витрата донних та звішених наносів зменшується, а при збільшенні висоти хвилі збільшується. Також швидкість течії має суттєвий вплив на розподіл та питому витрату об'єму наносів. За допомогою цих досліджень може бути підвищена ефективність роботи при розрахунку питомого об'єму наносів.

SUMMARY

Numerical calculations of dynamics of transport of deposits are executed and the border of sensitivity of a method is certain. So at the big depth and small height of a wave the method does not work. And for height of a wave 0,3 payment of each type of deposits in a total sum of transport is less Is certain. It is certain, that with increase in depth the expense of the ground and lowered deposits decreases, and at increase in height of a wave increases. Also speed of current has essential influence on distribution and a specific expense of volume of deposits. By means of these researches there can be a raised overall performance at calculation of specific volume of depositst.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иванов В.И., Михинов А.Е. Прогноз динамики наносов в прибрежной зоне моря (практические рекомендации и примеры расчетов)/ – Севастополь, 1991. – 51 с. (Препринт АН УССР. Морской гидрофизический институт).
2. Михинов А.Е. Транспорт наносов и динамика донного рельефа в береговой зоне открытых водоемов. – Депон. рукопись № 8123-В88. – М.ВИНИТИ, 1988.
3. Михинов А.Е. Транспортирующая и эрозионно-аккумулятивная способность волновых потоков в береговой зоне открытых водоемов.// Управление водными ресурсами вод суши: теория и практика. – М.: Наука, 1989.
4. Баклановская В.Ф., Михинов А.Е., Чечель М.И. Численное моделирование гидродинамики морской прибрежной зоны с учетом литодинамических процессов // Моделирование гидродинамических процессов и полей в замкнутых водоемах и морях. – М.: Наука? 1989. – С. 117-132.
5. Знаменская Н.С. Донные наносы и русловые процессы. – Л.: Гидрометеоиздат. 1976. – 189 с.
6. Trincardi F., Mimisini D., Verdicchio G., Asioli A., Piva A. Dating mass-transport deposits along continental margins affected by bottom currents. // Geophysical Research Abstracts, vol.9, 09057. – 2007 – P.177-186.
7. Rubin D. M., Chezar H., Harney J. N., Topping D. J., Melis T. S., Sherwood C.R. Underwater microscope for measuring spatial and temporal changes in bed –sediment grain size// Sedimentary Geology. – 2006. – 5 p.
8. Warner J., Sherwood C. R., Signell R. P., Harris C.K., Arango H.G. Development of three-dimentional, regional, coupled wave, current and sediment-transport model // Computers and Geosciences. – 2006. – 3 p.

Надійшла до редакції 20.11.2007 р.

Ф І З И К А

УДК 004.942:544.022.344.3:544.032.6

МД МОДЕЛЮВАННЯ РАДІАЦІЙНОГО ПОШКОДЖЕННЯ В СТРУКТУРІ ЦИРКОНУ

*А.С. Литовченко**, *О.Є. Гречанівський**, *О.Г.Петренко*,
**Інститут геохімії, мінералогії та рудоутворення ім. М.П. Семененка НАН України*

Вступ. Розвиток атомної енергетики породжує ряд проблем, що стосуються утилізації довго існуючих радіоактивних відходів (РАВ). Однією з найважливіших проблем у цьому сенсі є вибір радіаційно стійких матриць, які при контакті з довго існуючими високоактивними відходами (ВАВ) на протязі тривалого строку не будуть змінювати свої фізико-хімічні властивості. Склування ВАВ є звичайним способом захоронення ВАВ. Однак в останні десятиліття було показано, що для утилізації ВАВ кристалічна кераміка підходить значно краще. На цей час розроблено багато керамічних матеріалів для утилізації ВАВ [1-2]. Активно досліджуються такі матеріали, як рутил TiO_2, перовскіт $CaTiO_3$, цирконоліт $CaZrTi_2O_7$, баделіт ZrO_2, циркон $ZrSiO_4$, пірохлори $Gd_2Ti_2O_7$ та $Gd_2Zr_2O_7$, монацити $(Ce, La, Gd)PO_4$ та інші складні окисли [3-5].

Серед цих матеріалів структура циркону розглядається як одна з перспективних мінеральних матриць для утилізації довгоіснуючих високоактивних радіоактивних елементів, не дивлячись на те, що структура циркону переходить з кристалічного в аморфний (метаміктний) стан при дії на неї внутрішнього опромінення внаслідок α-розпаду атомів урану або торію на протязі сотень мільйонів років [6-7]. Загальна кількість атомів, зміщених з вузлів гратки під дією бомбардуючих частинок може бути розрахована за допомогою пакету програм SRIM [8]. Внаслідок α-розпаду ядер урану або торію утворюються [9]:

а.) α-Частинки з енергією 4,2÷5,5 МеВ, які в основному характеризуються електронним гальмуванням. α-Частинка на своєму шляху, довжина якого складає 10÷20 мкм, зміщує близько 100 атомів. Більшість з цих атомів зміщуються в кінці шляху α-частинки.

б.) Важкі ядра віддачі з енергією близько 0,08 МеВ, які в основному характеризуються ядерним гальмуванням. Ядро віддачі на своєму шляху, довжина якого складає 20 нм, зміщує близько 800 атомів.

Однак експерименти по рентгенівському опроміненню та по ЯМР показують, що кількість дефектів, створених в структурі циркону, становить 4000 атомів на один α-розпад [10, 11].

Оскільки формування більшості дефектів за рахунок дії утворених ядер віддачі відбувається протягом долей пікосекунди, то для дослідження кінетики формування дефектів та їх рекомбінації (часткового відновлення структури) необхідно виконувати комп'ютерне моделювання для конкретної структури.

На протязі останніх десятиріч було виконано багато досліджень щодо формування радіаційних дефектів в структурі циркону за допомогою методу МД моделювання [12-17]. Однак в цих статтях не були розглянуті механізми рекомбінації дефектів в структурі циркону відразу після формування каскаду зміщення. Тому метою даної роботи є розгляд цього питання, використовуючи метод молекулярної динаміки.

Методика МД моделювання. При моделюванні міжатомних взаємодій в цирконі були використані міжатомні потенціали [16]. Взаємодії Zr-O, Si-O та O-O були взяті у вигляді потенціалу Борна-Майера:

$$V_{ij}(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-r_{ij} / \rho_{ij}). \qquad (1)$$

Параметри A_{ij}, ρ_{ij} для вказаних взаємодій та величини ефективних зарядів q для кулонівського потенціалу приведені в табл. 1. На малих відстанях (менше 0,1 нм) парні потенціали розраховувались, беручи до уваги між'ядерний потенціал ZBL [16]. Для того, щоб перевірити дану модель структурициркону, була виконана оптимізація енергії з використанням пакету програм GULP [18]. Експериментальні значення параметрів елементарної гратки, довжин зв'язку між атомами, їх кутів зв'язку, постійних пружності та модуля об'ємної деформації порівнювались з відповідними оптимізованими значеннями, які були визначені з використанням цього пакету програм (табл. 2). Як можна побачити з табл. 2, відповідність між експериментальними та розрахованими значеннями є прийнятною.

Таблиця 1. Параметри, використані для парних потенціалів

Взаємодії	A_{ij} (еВ)	ρ_{ij} (нм)	Заряди (|e|)
Zr-O	1967,0	0,0305004	Zr: +3,8
Si-O	1277,0	0,0227225	Si: +2,0
O-O	1755,0	0,0306820	O: -1,45

Для МД моделювання була використана версія 3.06 пакету програм DL_POLY [19]. DL_POLY – пакет програм по моделюванню, розроблений Білом Смітом (W. Smith) та Т. Форестером (T.R. Forester) в Даресбургській лабораторії (Великобританія) у 1996 році. Фрагмент структури, що

© Литовченко А.С., Гречанівський О.Є., Петренко О.Г.

містить 44928 атомів (розміри цього фрагмента 8 нм×8 нм×8 нм), був приведений в стан рівноваги при температурі 300 К на протязі 10 пс, використовуючи ансамбль NPT. Після виконання цієї процедури одному атому цирконію (аналог атому віддачі) була надана швидкість, що відповідає енергії 4 кеВ. На жаль обмежені можливості обчислювальної техніки не дають можливість проводити розрахунки для більших (70÷80 кеВ) значень енергій. На це вказували й інші автори [12].

Таблиця 2. Порівняння підрахованих та експериментальних [16] кристалічних властивостей циркону

Фізичні властивості	Експериментальні	Підраховані (дана робота)	Відхилення (%)
Параметри елементарної гратки			
a, b (нм)	0,66070	0,66020	-0,08
c (нм)	0,59820	0,60934	1,86
Густина (кг/м^3)	4664,4	4584,5	-1,71
Довжини зв'язків			
Si-O (нм)	0,16223	0,16217	-0,04
Zr-O1 (нм)	0,21304	0,21328	0,11
Zr-O2 (нм)	0,22688	0,23190	2,21
Кути зв'язків			
O-Si-O (1)	97,000^0	97,205^0	0,21
O-Si-O (2)	116,044^0	115,931^0	-0,10
Постійні пружності			
C_{11} (ГПа)	424,0	445,4	5,05
C_{12} (ГПа)	70,0	64,1	-8,43
C_{13} (ГПа)	149,0	133,2	-10,60
C_{33} (ГПа)	490,0	479,2	-2,20
C_{44} (ГПа)	114,0	84,4	-25,96
C_{66} (ГПа)	49,0	63,9	30,41
Модуль об'ємної деформації (ГПа)	225,0	223,1	-0,84

МД моделювання виконано з використанням мікроканонічного ансамблю pseudo-(NVE). На протязі МД моделювання шар товщиною 0,3 нм на границях фрагменту структури був використаний для відкачки кінетичної енергії атомів з системи. На першому етапі МД моделювання швидкість зміщених атомів може досягати достатньо великих значень (до 10^5 м/с). Тому для регулювання значення часового шагу на протязі МД моделювання був використаний алгоритм змінного часового шагу. Цей алгоритм полягає у використанні двох відстаней D_{min} та D_{max}, що задаються користувачем (було узято $D_{min} = 2 \cdot 10^{-3}$ нм та $D_{max} = 6 \cdot 10^{-3}$ нм). В кінці кожного шагу алгоритм підраховує максимальну відстань, яку проходять атоми. Якщо досягається максимальна відстань (D_{max}), то значення часового шагу ділиться навпіл і шаг повторюється. Якщо найбільше зміщення атомів менше за мінімальну відстань (D_{min}), то значення часового шагу збільшується у два рази й шаг повторюється.

Результати та обговорення. Протягом руху атому віддачі його енергія внаслідок багатьох зіткнень розсіюється на оточуючих атомах, що зміщуються зі своїх початкових позицій. В результаті утворюється сильно пошкоджений аморфний регіон, що оточений слабо деформованими зонами, в яких наявні тільки точкові дефекти (наприклад розірвані зв'язки). Значна частина зміщених атомів встигає повернутися до своїх початкових позицій на протязі декількох пікосекунд, частково відновлюючи цим структуру циркону. Інші атоми формують каскад зміщення (рис. 1).

Для підрахунку кількості зміщених атомів ми вважали атом зміщеним, якщо він залишає сферу з центром в початковому положенні та з радіусом, що дорівнює половині відстані до найближчого атому. Проте деякі атоми на протязі еволюції каскаду зміщення рухаються зі своїх початкових позицій в еквівалентні кристалографічні позиції. Для врахування цього нами був використаний новий алгоритм визначення дефектів, що був нещодавно імплементований в DL_POLY_3 [20].

Цей алгоритм порівнює гратку, яку моделюють, з початковою граткою. Перша гратка визначає поточні положення атомів та їх типи, а остання визначає початкові положення атомів. Якщо атом p знаходиться поблизу вузла s, що визначається сферою з центром в цьому вузлі та радіусом, що задається користувачем, 0,03 нм $\le R_{def} \le$ 0,13 нм (нами було взято R_{def} = 0,075 нм), то атом є «первинним претендентом на вузол s», й цей вузол не є вакантним. В іншому випадку вузол вважається вакантним і атом вважається загальним міжвузлям. Якщо вузол s зайнятий, й інший атом p' знаходиться всередині сфери біля нього, то p' стає міжвузлям, пов'язаним з s. Після того, як всі атоми та всі вузли розглянуті, стає зрозумілим, які вузли вакантні. Останній етап алгоритму полягає у порівнянні відстані між вузлом і його «пер-

винним претендентом» та відстаней між вузлом та міжвузлями. Атом, що характеризується меншою відстанню, стає «реальним претендентом». Якщо «первинний претендент» не є «реальним претендентом», то він стає міжвузлям, пов'язаним з *s*. На цій стадії стає зрозумілим, які атоми є міжвузлями.

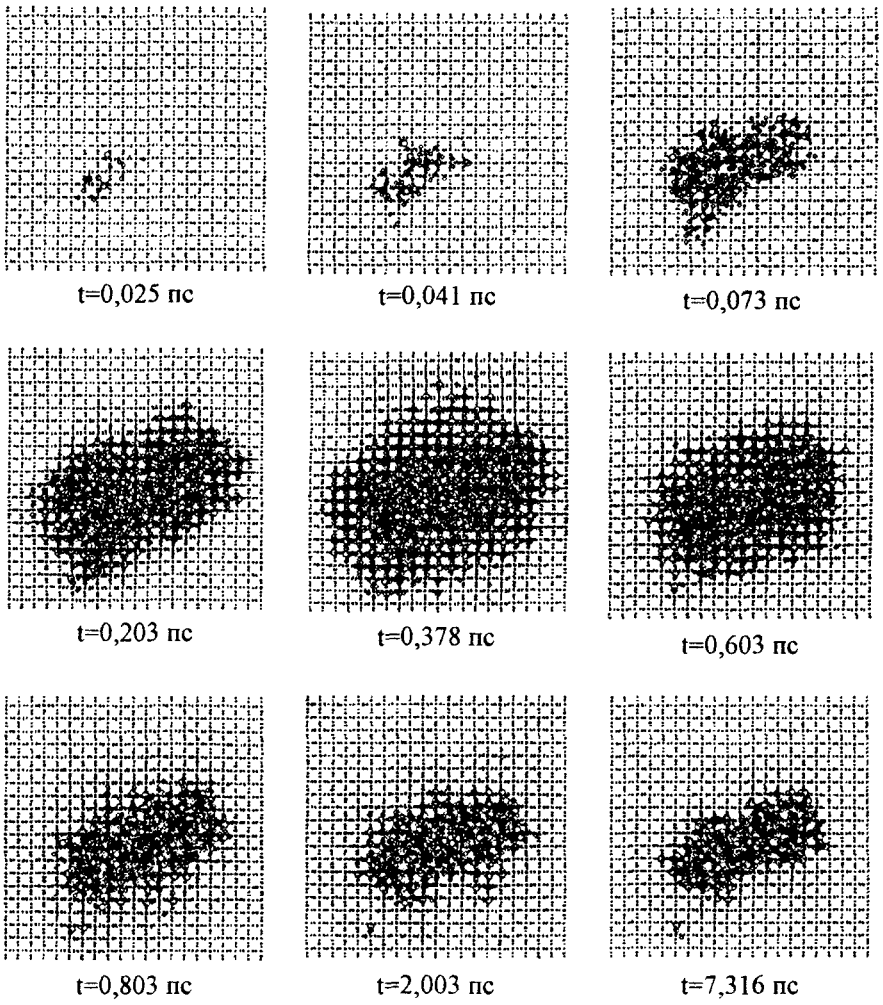


Рис. 1. Розвиток каскаду зміщення в структурі циркону. Більш великі чорні та білі шари відповідають відповідно зміщеним атомам Zr та Si, менші сірі шари відповідають зміщеним атомам O (площина малюнка перпендикулярна [001])

Використовуючи цей алгоритм, була побудована залежність кількості міжвузельних атомів, що утворюються в структурі циркону під час руху атому віддачі, від часу (рис. 2).

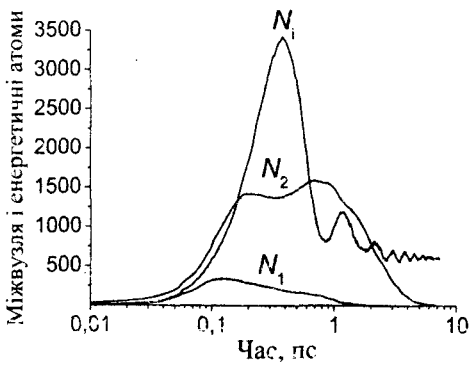


Рис. 2. Залежність кількості міжвузельних (N_i), енергетичних (N_1) та "розплавлених"атомів (N_2) від часу

Як видно з рис. 2, кількість міжвузельних атомів (N_i) досягає максимального значення при $t_1 = 0{,}39$ пс. Після цього часу N_i швидко зменшується в часовому проміжку $t \approx 0{,}39 \div 0{,}83$ пс. Після цього N_i повільно зменшується внаслідок подальшої релаксації структури. В кінці МД моделювання кількість міжвузельних атомів складає 600 атомів.

Для аналізу цих результатів була побудована залежність кількості енергетичних атомів N_1 (з енергією $E = 1 \div 2$ еВ) та кількості «розплавлених» атомів N_2 (з енергією $E = (E_{пл} \div 1)$ эВ, $E_{пл} = (3/2) \cdot kT_{пл} = 0{,}3$ еВ, k – постій-на Больцмана, $T_{пл} = 2400$ К – температура плавлення циркону) від часу (рис. 2).

Як можна побачити, N_1 починає швидко збільшуватися після $t \approx 0{,}04$ пс та досягає свого

...ктуру при $t \approx 0{,}12$ пс ($N_1 = 360$ атом...
...викликаючи цим утворення дефектів...
...томів в часовому інтервалі $t \approx 0{,}39 \div 0{,}8$...
...тів, становить 1440÷1620 атомів. Після ц...
повільна рекомбінація дефектів. Після t ...

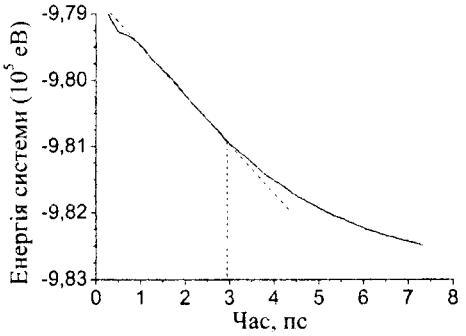


Рис. 3. Залежність повної енергії системи (потенційної та кінетичної) від часу

...явлених атомів, рух яких ...
...ня структури на границі ...верхні розділу між аморфною зоною та кристалічною частиною структури (матрицею). З іншого боку, через цю поверхню в б...матриці відбувається перенос тепла (рис. 3). При цьому необхідна енергія «розплавлених» атомів (E_{min}) підтримується за рахунок передачі їм енергії енергетичними атомами (рис. 2). Однак настає момент часу ($t \approx 1{,}2$ пс), коли кількість таких атомів вже є недостатньою для збереження кількості «розплавлених» атомів. Після $t = 2{,}5$ пс $N_1 \approx 0$, що корелює з практично миттєвим припиненням відновлення дефектів, та узгоджується з тим, що після $t = 3$ пс швидкість «відводу» енергії з системи зменшується (рис. 3). Останній факт пов'язаний з тим, що починаючи з часу $t = 1{,}2$ пс аморфна зона ділиться на області, в одних з яких є «розплавлені» атоми, а в інших вони відсутні. З часом другі області збільшуються за рахунок перших областей, що викликає зменшення швидкості «відводу» енергії з системи та зменшення швидкості рекомбінації дефектів.

Як відомо [13, 17], аморфізація структури циркону супроводжується процесом полімеризації, що полягає в утворенні «мостикових» атомів кисню, які формують зв'язки Si-O-Si. Тому для розгляду процесів накопичення дефектів та їх рекомбінації необхідно розглядати взаємне розміщення атомів Si та O під час МД моделювання структури циркону.

З цією метою була розрахована функція радіального розподілу [21]

$$g_{\alpha\beta}(r) = \frac{1}{4\pi\rho_\beta r^2}\frac{dn_\beta}{dr}, \qquad (2)$$

де dn_β – кількість атомів β між сферами с радіусами r та $r+dr$, центр яких суміщений з атомом α; ρ_β – густина атомів β (кількість атомів на одиницю об'єму) в фрагменті структури циркону при рівновазі.

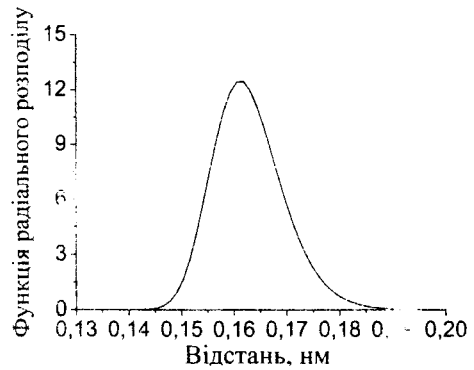


Рис. 4. Функція радіального розподіл...ля пари атомів Si-O

На ...с. 4 зображений перший пік ...ції ра...льно... розподілу для пари атомів ...О ...ля с...труктури ...ркону, що знаходиться в кр...та...-но...стан... видно, що у цьому випадку ...ма...-на...дста... Si-O становить більше, ніж ...4 ...Å. О...ськи...язі форм...ання в структурі ...ону д...тів з...ляється д...ка кількість пар ат...ів Si-O, ...находяться з...менші відстані ...2 ...-ліз...ння з...ички таки...в'язків було поб...ов...о за...ежність ...д часу ...кості зв'язків Si...( ), ...их ...стані ...ють менше 0,14... (...с. 5 пок...є, що максималь...ть-...зв'язків ...ягається при $t \approx 4$...с, ...ся ...є м...ьній кількості мі...-...-...ркону (рис. 2). ...що ві...є

...ладської структури. Більш повільний спад N_3...

...подальшого вивчення кінетик...

...можливо кінетика зменшення кількості...

...величини (N_2, ...

...ли зі своїх ...

міжвузельними атомами), формуються ще під час формування каскаду зміщення (N_d-N_i = 138 для t = 0,34 пс). В інтервалі $t \approx 0{,}39 \div 0{,}83$ пс, на протязі якого відбувається швидка рекомбінація дефектів, кількість таких атомів не змінюється, та досягає в кінці моделювання величини N_d-N_i = 204.

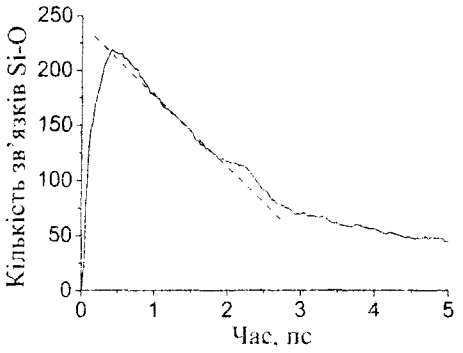


Рис. 5. Кількість зв'язків Si-O, для яких відстані менші 0,14 нм

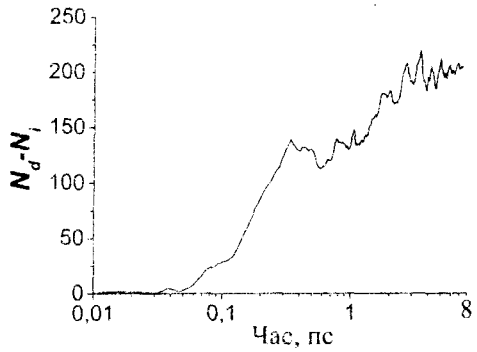


Рис. 6. Залежність (N_d-N_i) від часу

Висновки. Методом МД моделювання показано, що максимальна кількість міжвузельних атомів в структурі циркону (при початковій кінетичній енергії атому цирконію 4 кеВ) N_i = 3430 досягається при t ≈ 0,39 пс. В часовому інтервалі $t \approx 0{,}39 \div 0{,}83$ пс N_i швидко зменшується, після чого відбувається повільне зменшення кількості міжвузельних атомів. В кінці МД моделювання $N_i \approx 600$ атомів.

Була побудована залежність від часу кількості енергетичних та «розплавлених» атомів, а також кількості зв'язків Si-O, для яких відстані менші 0,14 нм. Максимальна кількість енергетичних атомів досягається при $t \approx 0{,}12$ пс, після чого вони втрачають свою енергію, викликаючи цим створення дефектів в структурі циркону. З іншого боку, в часовому інтервалі $t \approx 0{,}39 \div 0{,}83$ пс існують значні кількості «розплавлених» атомів (1440÷1620 атомів) і неоднорідності в концентраціях атомів. Тому в цьому часовому інтервалі кількість дефектів швидко зменшується. Після цього (в інтервалі $t \approx 0{,}83 \div 2{,}5$ пс) кількість «розплавлених» атомів починає швидко зменшуватись, внаслідок чого відбувається повільне зменшення дефектів. Після $t \approx 2{,}5$ пс кількість енергетичних атомів практично дорівнює нулю, внаслідок чого подальшого відновлення структури не спостерігається.

Запропонований механізм рекомбінації дефектів, які виникають відразу після формування каскаду зміщення. Встановлено, що відновлення атомів в каскаді зміщення відбувається в два етапи. На протязі першого етапу відбувається швидке відновлення дефектів; при цьому кількість розплавлених атомів змінюється незначно за рахунок передачі їм енергії енергетичними (з енергією вище 1 еВ) атомами. Тому на протязі цього етапу відновлення структури відбувається по всій поверхні розділу між каскадом зміщення та непошкодженою областю матеріалу. Однак настає момент часу (початок другого етапу), коли кількість «розплавлених» атомів починає зменшуватися, і швидкість рекомбінації дефектів значно зменшується.

Відновлення дефектів в каскаді зміщення відбувається в основному на границі розділу між кристалічною матрицею та каскадом зміщення.

Подяки. Автори вдячні Білу Сміту за отримання академічної ліцензії на програму DL_POLY, а також вдячні Костянтину Траченко за корисні обговорення.

РЕЗЮМЕ

Методом молекулярной динамики изучена кинетика образования и аннигиляции дефектов в структуре циркона ($ZrSiO_4$) за счёт распада атомов U, Th при температуре 300 K. В качестве межатомных потенциалов был использован потенциал Борна-Майера, а в качестве атома отдачи – атом циркония с начальной кинетической энергией 4 кэВ.

Показано, что во временном интервале $t \approx 0{,}39 \div 0{,}83$ пс, в котором существуют максимальные количества «расплавленных» атомов (1440÷1620 атомов) и неоднородности в концентрациях атомов, количество междоузельных атомов быстро уменьшается (от 3430 до 810 атомов). После t = 0,83 пс количество «расплавленных» атомов начинает быстро уменьшаться, вследствие чего происходит медленное уменьшение указанных дефектов (до 600 атомов в интервале $t \approx 0{,}83 \div 2{,}5$ пс). После t = 2,5 пс восстановление структуры не наблюдается вследствие отсутствия в ней энергетических атомов.

SUMMARY

Defect production and defect annihilation in collision cascades in zircon ($ZrSiO_4$) due to U, Th decays at 300 K have been examined by molecular dynamics (MD) simulations with empirical potentials of the Born-Mayer type, where a zirconium atom was used as the primary knock-on atom with a kinetic energy of 4 keV.

The results of the MD simulations show that for time interval $t \approx 0.39 \div 0.83$ ps, which corresponds to maximal number of molten atoms (1440÷1620 atoms) and nonuniformly atoms distribution, the number of interstitials decreases rapidly (from 3430 to 810 interstitials). After $t = 0.83$ ps the number of interstitials decreases slowly (from 810 to 600 interstitials for $t \approx 0.67 \div 2.5$ ps) due to rapidly decreasing of molten atoms. After $t = 2.5$ ps structure recovery has not been observed due to absence of energetic atoms.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Ringwood A.E., Kesson S.E., Ware N.G., Hibberson W.O., Major A. Immobilization of high level nuclear reactor wastes in SYNROC // Nature. – 1979. – Vol. 278. – P.219-223.
2. Ewing R.C., Lutze W., Weber W.J. Zircon: A host phase for the disposal of weapons plutonium // J. Mater. Res. – 1995. – Vol. 10. – P.243.
3. Sickafus K.E., Minervini L., Grimes R.W., Valdez J.A., Ishimaru M., Li F., McClellan K.J., Hartmann T. Radiation Tolerance of Complex Oxides // Science. – 2000. – Vol. 289. – P. 748-751.
4. Meldrum A., Zinkle S.J., Boatner L.A., Ewing R.C. Heavy-ion irradiation effects in the ABO_4 orthosilicates: Decomposition, amorphization, and recrystallization // Phys. Rev. B. – 1999. – Vol. 59. – P.3981-3992.
5. Hobbs L.W., Clinard F.W., Zinkle S.J., Ewing R.C. Radiation effects in ceramics // J. Nucl. Mater. – 1994. – Vol. 216. – P. 291-321.
6. Weber W.J., Ewing R.C., Wang L.-M. The radiation-induced crystalline-to-amorphous transition in zircon // J. Mater. Res. – 1994. – Vol. 9, N 3. – P. 688-698.
7. Shpak A.P., Grechanovsky A.E., Lytovchenko A.S., Legkova G.V., Sayenko S.Yu. Influence of temperature and uranium on the radiation stability of zircon // J. Nucl. Mater. – 2005. – Vol. 347. – P. 73-76.
8. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The Stopping and Range of Ions in Solids. New York: Pergamon, 1985. – 321 p.
9. Robinson M.T. Basic physics of radiation damage production // J. Nucl. Mat. – 1994. – Vol. 216. – P. 1-28.
10. Ríos S., Salje E.K.H., Zhang M., Ewing R.C. Amorphization in natural zircon: evidence for direct impact damage // J. Phys.: Condens. Matter. – 2000. – Vol. 12. – P. 2401-2412.
11. Farnan I., Salje E.K.H. The degree and nature of radiation damage in zircon observed by ^{29}Si nuclear magnetic resonance // J. Appl. Phys. – 2001. – Vol. 89, Issue 4. – P. 2084-2090.
12. Trachenko K.O., Dove M.T., Salje E.K.H. Atomistic modelling of radiation damage in zircon // J. Phys.: Condens. Matter. – 2001. – Vol. 13. – P. 1947-1959.
13. Crocombette J.-P., Ghaleb D. Molecular dynamics modeling of irradiation damage in pure and uranium-doped zircon // J. Nucl. Mater. – 2001. – Vol. 295. – P. 167-178.
14. Trachenko K.O., Dove M.T., Geisler T., Todorov I., Smith B. Radiation damage effects and percolation theory // J. Phys.: Condens. Matter. – 2004. – Vol. 16. – P. 2623-2627.
15. Akhtar M.J., Waseem S. Atomistic simulation studies of zircon // J. Chem. Phys. – 2001. – Vol. 274. – P. 109-120.
16. Devanathan R., Corrales L.R., Weber W.J., Chartier A., Meis C. Molecular dynamics simulation of disordered zircon // Phys. Rev. B. – 2004. – Vol. 69, № 6. – P. 064115.
17. Devanathan R., Corrales L.R., Weber W.J., Chartier A., Meis C. Molecular dynamics simulation of defect production in collision cascades in zircon // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. – 2005. – Vol. 228. – P. 299-303.
18. Gale J.D. Empirical potential derivation for ionic materials // Philos. Mag. B. – 1996. – Vol.73. – P. 3-19.
19. Todorov I.T., Smith W. DL_POLY_3: the CCP5 national UK code for molecular-dynamics simulations // Phil. Trans. R. Soc. A. – 2004. – Vol. 362. – P. 1835-1852.
20. Todorov I.T., Purton J.A., Allan N.L., Dove M.T. Simulation of radiation damage in gadolinium pyrochlores // J. Phys.: Condens. Matter. – 2006. – Vol. 18. – P. 2217-2234.
21. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids. – Oxford: Clarendon Press, 1989. – 385 p.

Надійшла до редакції 31.10.2007 р.

УДК 535.39:535.01:535.323

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ СВЕТА В СВЕРХТОНКОМ КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ СЛОЕ

С.Н.Латынин,
Донецкий национальный университет экономики и торговли имени М. Туган-Барановского

Введение

Распространение электромагнитных волн в слоистых кристаллических средах и кристаллических пленках малой толщины рассматривается в одном из разделов кристаллооптики и широко исследовалось в [1,2,3,4] и других работах. Если толщина пленки H больше или сравнима с длиной волны λ, то применима макроскопическая теория [1,2] при этом законы дисперсии «объемных» светоэкситонов и показатель преломления в таких пленках такие же, как в неограниченном кристалле [3]. При исследовании распространения света в сверхтонких кристаллических пленках $(H << \lambda)$, в слоистых монокристаллах типа $RBa_2Cu_3O_{l-x}$ и внутри переходного слоя кристалла порядка нескольких постоянных решетки a необходимо применять микроскопическую теорию [4], так как в таких средах теряет смысл само понятие макрополя и неприменимы макроскопические уравнения Максвелла.

В [5] при применении теории Лоренц-Лоренца к сверхтонкому кристаллическому слою в качестве поляризуемой структурной единицы кристалла рассматривалась моноатомная кристаллическая плоскость. Это позволило в рамках макроскопического подхода, без конкретизации микроскопической модели вещества, рассмотреть взаимодействие света со сверхтонкой пленкой. В отличие от «обобщенного феноменологического подхода» [5] в работе [6] исследовано, в методе действующего поля, взаимодействие электромагнитных волн с двумерно-периодическим кристаллическим слоем произвольной толщины, структурной поляризуемой единицей которого является молекула (атом, ион или ковалентная связь). Если не учитывать дополнительную поверхностную поляризацию (ДПП) молекул, то микроскопическая теория не дает отклонений от результатов макротеории при описании отражении света на сверхтонком кристаллическом слое и слоистом монокристалле.

Получаемая в методе действующего поля ДПП молекул [7], связанная с отличием внутрикристаллического поля в кристаллическом слое от такового в неограниченном кристалле, должна приводить к поверхностным волнам, которые искажают законы дисперсии «объемных» светоэкситонов и законы отражения и преломления волн. Кроме того, законы отражения и преломления волн на слое должны зависеть от структуры поверхности – типа поверхностной кристаллографической плоскости. Все это наиболее сильно должно проявиться при рассмотрении сверхтонких кристаллических слоев.

В настоящей работе исследуется распространение света в сверхтонком кристаллическом слое с поверхностными равновесными гранями и рассчитываются отраженные, преломленные и прошедшие волны с учетом ДПП молекул. Это потребует обобщение метода Эвальда на кристаллический слой, где необходимо учесть возникающую на обоих гранях ДПП молекул.

Обобщение метода Эвальда на сверхтонкий кристаллический слой

Рассмотрим падение плоской монохроматической волны $\vec{E}^{(e)} = \vec{E}_0^{(e)} \exp\left(i\vec{k}_0\vec{r} - i\omega t\right)$, с частотой ω и волновым вектором $\vec{k}_0 = \left(\vec{k}_\perp, k_{03}\right)$ (где $k_0 = \omega a/c$, «$\perp$» – обозначает проекцию вектора на поверхность), на тонкий кристаллический слой с поверхностной кристаллографической плоскостью типа $(m_1 m_2 m_3)$, где m_1, m_2 и m_3 – индексы Миллера. Пусть кристаллический слой состоит из N_3 молекулярных плоскостей, поверхностные грани которого параллельны координатной плоскости xOy.

Дипольный момент $\begin{pmatrix} l \\ s \end{pmatrix}$– ой молекулы кристаллического слоя представим в виде:

$$\vec{P}_s^l = \vec{P}_s^{l_3} \exp\left(i\vec{k}_\perp \vec{r}_{s\perp}^{\,l} - i\omega t\right), \qquad (1)$$

где

$$\vec{P}_s^{l_3} = \sum_{m=+,-} \vec{P}_{0s}\left(\vec{k}_\perp, mk_3\right)\exp\left(imk_3 r_{s3}^l\right) + \sum_{\vec{Q}_\perp \neq 0} \vec{B}_s\left(\vec{Q}_\perp\right)\left[1 + \sum_{n=1}^{l_3-1}\frac{1}{n!}\prod_{i=1}^{n}(l_3 - i)\right]\exp\left(-\gamma_q r_{s3}^l + i\vec{Q}_\perp \vec{r}_{s\perp}^{\,l}\right) +$$

© Латынин С.Н.

$$+\sum_{\vec{Q}_\perp\neq 0}\tilde{\vec{B}}_s\left(\vec{Q}_\perp\right)\left[1+\sum_{n=1}^{N_3-l_3}\frac{1}{n!}\prod_{i=1}^{n}\left(N_3-l_3-i+1\right)\right]\exp\left(-\gamma_q r_{s3}^{N-l}+i\vec{Q}_\perp\vec{r}_{s\perp}^{\,N-l}\right); \qquad (2)$$

$\vec{k}=\left(\vec{k}_\perp,mk_3\right)$ – волновые векторы светоэкситонов в кристалле (в единицах a); $m=+,-$ (здесь учтена отраженная на нижней грани слоя волна); s – номер молекулы в элементарной ячейке; $\vec{r}_s^{\,l}=\left(\vec{r}_{s\perp}^{\,l},\vec{r}_{s3}^{\,l}\right)$ и $\vec{r}_s^{\,N-l}=\left(\vec{r}_{s\perp}^{\,N-l},\vec{r}_{s3}^{\,N-l}\right)$ – радиус-векторы $\binom{l}{s}$-ой молекулы (в единицах a); $r_{s3}^{l}=d_3\left(l_3-1\right)+r_{s3}$; $r_{s3}^{N-l}=d_3\left(N_3-l_3\right)+r_{s3}$; $\vec{r}_{s\perp}=\left(r_{s1};r_{s2}\right)$; $\vec{r}_{s\perp}^{\,l}=(l_1h_1+\ +l_2f_1+\left(l_3-1\right)d_1+\frac{1}{2}g_1+r_{s1};l_2h_2+$ $+\left(l_3-1\right)d_2+\frac{1}{2}g_2+r_{s2})$; $\vec{r}_{s\perp}^{\,N-l}=(l_1h_1+l_2f_1+\left(N_3-l_3\right)d_1+\ +\frac{1}{2}g_1+r_{s1};l_2h_2+\left(N_3-l_3\right)d_2+$ $+\frac{1}{2}g_2+r_{s2})$; $\gamma_q=\sqrt{\left(\vec{Q}_\perp-\vec{k}_\perp\right)^2-k_0^2}$; $\vec{Q}_\perp=\left(Q_1;Q_2\right)=2\pi\left(\frac{q_1}{h_1};\frac{q_2}{h_2}-\frac{f_1q_1}{h_1h_2}\right)$ – вектор обратной решетки; q_1,q_2, l_1,l_2 и l_3 - целые числа ($0<l_3\le N_3$); параметры d_1,d_2,d_3, h_1,h_2,f_1,g_1,g_2 - определяются через индексы Миллера [7], так межплоскостное расстояние $d_3=\dfrac{1}{K\sqrt{m_1^2+m_2^2+m_3^2}}$, где для ПК решетки $K=1$, а для ГЦК решетки $K=2$, если один или два индекса Миллера нечетные числа и для ОЦК решетки, если $m_1+m_2+m_3$ - нечетное число, а в остальных случаях $K=1$. Первое слагаемое в (2) определяет «объемную» поляризацию молекул кристалла, с амплитудами не изменяющимися с глубиной, а второе и третье слагаемые – их дополнительную поверхностную поляризацию соответственно у верхней и нижней грани кристаллического слоя.

Дипольный момент (1) рассчитывается самосогласованным образом из системы уравнений:

$$\vec{P}_s^{\,l}=\alpha_s(\omega)\left[\vec{E}_s^{\,l(*)}+\vec{E}^{(e)}\right], \qquad (3)$$

$$\vec{E}_s^{\,l(*)}=\frac{1}{a^3}\left[\vec{\nabla}\vec{\nabla}-\frac{a^2}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right]\left(\vec{\Pi}_1(\vec{r},t)+\vec{\Pi}_2(\vec{r},t)\right) \qquad (4)$$

при $\vec{r}=\vec{r}_s^{\,l}$, где вектора Герца $\vec{\Pi}_1(\vec{r},t)$ и $\vec{\Pi}_2(\vec{r},t)$ можно рассчитать по методу Эвальда, обобщенному на двумерно-периодические структуры [7]:

$$\vec{\Pi}_1(\vec{r},t)=\frac{2\pi}{\Omega_\perp}\sum_{s'}\sum_{g_1g_2}\sum_{\vec{Q}_\perp}\frac{1}{\gamma_q}\left\langle\sum_{l_3'=1}^{l_3-1}+\sum_{l_3'=l_3+1}^{N_3}+\left(1-\delta_{ss'}\right)\sum_{l_3'=l_3}\right\rangle\vec{P}_{s'}^{\,l_3'}\times$$
$$\times\exp\left(-\gamma_q\left|r_3-r_{s'3}^{\,l'}\right|+i\vec{Q}_\perp\left(\vec{r}_\perp-\vec{r}_{s'\perp}^{\,l'}\right)+i\vec{k}_\perp\vec{r}_\perp-i\omega t\right); \qquad (5)$$

$$\vec{\Pi}_2(\vec{r},t)=\frac{\pi}{\Omega_\perp}\sum_{g_1,g_2}\sum_{\vec{Q}_\perp}\frac{1}{\gamma_q}\exp\left(i\vec{Q}_\perp\left(\vec{r}_\perp-\vec{r}_{s\perp}\right)\right)\left[\exp\left(-\gamma_q\left|r_3-r_{s3}^{\,l}\right|\right)\left(1-\Phi\left(\frac{\gamma_q}{2\sqrt{\pi}}-\sqrt{\pi}\left|r_3-r_{s3}^{\,l}\right|\right)\right)+\right.$$
$$\left.+\exp\left(\gamma_q\left|r_3-r_{s3}^{\,l}\right|\right)\left(1-\Phi\left(\frac{\gamma_q}{2\sqrt{\pi}}+\sqrt{\pi}\left|r_3-r_{s3}^{\,l}\right|\right)\right)\right]\vec{P}_s^{\,l_3}\exp\left(i\vec{k}_\perp\vec{r}_\perp-i\omega t\right)+\frac{2}{\sqrt{\pi}}\delta_{l_3'l_3}\delta_{ss'}\times$$
$$\times\sum_{\substack{\vec{r}_\perp^{\,l'},\\ \vec{r}_{s'}^{\,l'}\neq\vec{r}_s^{\,l}}}\left(\int_{\sqrt{\pi}}^{\infty}\exp\left(-x^2\left(\vec{r}-\vec{r}_s^{\,l'}\right)^2+\frac{k_0^2}{4x^2}\right)dx-\delta_{l'l}\delta_{ss'}\left(2-\frac{2\pi}{3}\left(\vec{r}-\vec{r}_s^{\,l}\right)^2+\ldots\right)\right)\vec{P}_s^{\,l_3'}\exp\left(i\vec{k}_\perp\vec{r}_{s\perp}^{\,l'}-i\omega t\right), \qquad (6)$$

где $\Omega_\perp = h_1 h_2$ – объем элементарной ячейки кристаллической плоскости $(m_1 m_2 m_3)$; $\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt$; $\alpha_s(\omega)$ – дипольная поляризуемость s-ой молекулы. В (4) первое слагаемое дает поле создаваемое молекулами всех плоскостей кроме $\begin{pmatrix} l_3 \\ s \end{pmatrix}$-ой, а второе – это поле $\begin{pmatrix} l_3 \\ s \end{pmatrix}$-ой молекулярной плоскости, за исключением $\begin{pmatrix} l \\ s \end{pmatrix}$-й молекулы, в окрестности которого рассчитывается поле.

При помощи преобразований

$$\sum_{j=1}^{l-1-n} \prod_{i=1}^{n} (j+n-i) x^j = \frac{n!}{(1-x)^{n+1}} \left\{ x - x^l - \sum_{p=1}^{n} \frac{1}{(n-p+1)!} \prod_{j=1}^{n-p+1} (l-j) \frac{x^{l-n+p-1}}{(1-x)^{p-n-1}} \right\} \tag{7}$$

и

$$\sum_{n=1}^{l-1} \frac{1}{n!} \sum_{j=1}^{l-1-n} \prod_{i=1}^{n} (j+n-i) x^{j+n} = \frac{x^2 (1-x^{l-1})}{(1-x)(1-2x)} - \frac{x^l}{1-2x} \sum_{n=1}^{l-1} \frac{1}{n!} \prod_{j=1}^{n} (l-j), \tag{8}$$

где $x = \exp\left(-(\gamma_{q'} \pm \gamma_q) d_3 + i(Q'_{\perp 1} \pm Q_{\perp 1}) d_1 + i(Q'_{\perp 1} \pm Q_{\perp 1}) d_1\right)$, можно получить преобразования конечных сумм в (5). В результате громоздких вычислений справа в (3) получим выражения:

$$E_\alpha^{(e)} - \sum_{s'} \sum_{\vec{Q}_\perp} \rho_{\alpha\beta}^- \exp(\gamma_q r_{s'3} + i\vec{Q}_\perp (\vec{r}_\perp - \vec{r}_{ss'\perp})) \left\{ \sum_{m=+,-} \Delta \frac{\exp(imk_3 r_{s'3}) \vec{P}_{0s'}(\vec{k}_\perp, mk_3)}{1 - \exp\left((imk_3 + \gamma_q) d_3 - iQ_{\perp 1} d_1 - iQ_{\perp 2} d_2\right)} + \right.$$

$$+ \sum_{\vec{q}'_\perp \neq 0} \Delta' \exp(-\gamma_{q'} r_{s'3} + i\vec{Q}'_\perp \vec{r}_{s'\perp}) \left[\frac{\vec{B}_{s'}(\vec{Q}'_\perp)}{1 - 2\exp\left(-(\gamma_{q'} - \gamma_q) d_3 + i(Q'_{\perp 1} - Q_{\perp 1}) d_1 + i(Q'_{\perp 2} - Q_{\perp 2}) d_2\right)} + \right.$$

$$\left. \left. + \frac{2^{N_3} \vec{\vec{B}}_{s'}(\vec{Q}'_\perp) \exp\left(-\gamma_{q'} d_3 (N_3 - 1) + i(Q'_{\perp 1} d_1 + Q'_{\perp 2} d_2)(N_3 - 1)\right)}{2 - \exp\left((\gamma_{q'} + \gamma_q) d_3 - i(Q'_{\perp 1} + Q_{\perp 1}) d_1 - i(Q'_{\perp 2} + Q_{\perp 2}) d_2\right)} \right] \right\} \exp(-\gamma_q r_3 + i\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp - i\omega t) = 0; \tag{9}$$

$$\sum_{s'} \sum_{\vec{Q}_\perp} \rho_{\alpha\beta}^+ \exp(-\gamma_q r_{s'3} + i\vec{Q}_\perp (\vec{r}_\perp - \vec{r}_{ss'\perp})) \left\{ \sum_{m=+,-} \Delta \frac{\exp(imk_3 (r_{s'3} + d_3 (N_3 - 1))) P_{0s'\beta}(\vec{k}_\perp, mk_3)}{1 - \exp\left(-(imk_3 - \gamma_q) d_3 + iQ_{\perp 1} d_1 + iQ_{\perp 2} d_2\right)} + \right.$$

$$+ \sum_{\vec{q}'_\perp \neq 0} \Delta' \exp(-\gamma_{q'} r_{s'3} + i\vec{Q}'_\perp \vec{r}_{s'\perp}) \left[\frac{\vec{\vec{B}}_{s'}(\vec{Q}'_\perp)}{1 - 2\exp\left(-(\gamma_{q'} - \gamma_q) d_3 + i(Q'_{\perp 1} + Q_{\perp 1}) d_1 + i(Q'_{\perp 2} + Q_{\perp 2}) d_2\right)} + \right.$$

$$\left. \left. + \frac{2^{N_3} \vec{B}_{s'}(\vec{Q}'_\perp) \exp\left(-\gamma_{q'} d_3 (N_3 - 1) + i(Q'_{\perp 1} d_1 + Q'_{\perp 2} d_2)(N_3 - 1)\right)}{2 - \exp\left((\gamma_{q'} + \gamma_q) d_3 - i(Q'_{\perp 1} - Q_{\perp 1}) d_1 - i(Q'_{\perp 2} - Q_{\perp 2}) d_2\right)} \right] \right\}$$

$$\exp\left(-i(Q_{\perp 1} d_1 + Q_{\perp 2} d_2)(N_3 - 1) + \gamma_q (r_3 - d_3 (N_3 - 1))\right) + i\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp - i\omega t) = 0, \tag{10}$$

где $\Delta = \exp\left(-iQ_1 \frac{g_1}{2} - iQ_2 \frac{g_2}{2}\right)$; $\Delta' = \Delta \exp\left(iQ'_1 \frac{g_1}{2} + iQ'_2 \frac{g_2}{2}\right)$; $2^{N_3} = \sum_{n=0}^{N_3} \frac{1}{n!} \prod_{i=1}^{n} (N_3 - i)$;

$\rho^{\mp}_{\alpha\beta} = -\frac{2\pi}{a^3\Omega_\perp\gamma_q}\left(\left(ik_{\perp\alpha} + iQ_{\perp\alpha} \mp \gamma_q\delta_{\alpha 3}\right)\left(ik_{\perp\beta} + iQ_{\perp\beta} \mp \gamma_q\delta_{\beta 3}\right) + k_0^2\delta_{\alpha\beta}\right)$. При переходе к моно-

слою нужно положить в (9) и (10) $N_3 = 1$.

Если $\vec{Q}_\perp = 0$ (тогда $\gamma_q = -ik_{03}$), то приравняв коэффициенты при $\exp\left(i\vec{k}_0\vec{r} - i\omega t\right)$ из (9) получим теорему погашения в тонком кристаллическом слое, где учтена ДПП молекул. Если связать в (10) коэффициенты при $\exp\left(i\vec{k}_\perp\vec{r}_\perp - ik_{03}r_3 - i\omega t\right)$, то получим закон отражения волн на нижней грани внутри слоя; он определяется отдельно для каждой s -ой волны.

Рассмотрим в (9) и (10) неоднородные компоненты ($\vec{Q}_\perp \neq 0$). Получим бесконечную систему уравнений относительно $\vec{B}_s\left(\vec{Q}'_\perp\right)$ и $\vec{\tilde{B}}_s\left(\vec{Q}'_\perp\right)$. Её можно использовать для связи амплитуд $\vec{B}_s\left(\vec{Q}'_\perp\right)$ и $\vec{\tilde{B}}_s\left(\vec{Q}'_\perp\right)$ с $P_{0s\beta}\left(\vec{k}_\perp, mk_3\right)$. Так как $\det\left|\rho^{\mp}_{\alpha\beta}\right| \neq 0$, то при условии $k_3d_3\left(N_3 - 1\right) << 1$ из (9) и (10) получим

$$\left.\begin{matrix}\vec{B}_s\left(\vec{Q}'_\perp\right)\\ \vec{\tilde{B}}_s\left(\vec{Q}'_\perp\right)\end{matrix}\right\} = V_s\left(\vec{Q}'_\perp, N_3\right)\sum_{m=+,-}\vec{P}_{0s}\left(\vec{k}_\perp, mk_3\right), \tag{11}$$

где $V_s\left(\vec{Q}'_\perp, N_3\right) \sim \frac{1}{1 - \exp\left(\left|\vec{Q}'_\perp\right|d_3\right)}$. Получаем, что $\vec{B}_s\left(\vec{Q}'_\perp\right) = \vec{\tilde{B}}_s\left(\vec{Q}'_\perp\right)$ и направления векторов $\vec{B}_s\left(\vec{Q}'_\perp\right)$, $\vec{\tilde{B}}_s\left(\vec{Q}'_\perp\right)$ и $\sum_{m=+,-}\vec{P}_{0s}\left(\vec{k}_\perp, mk_3\right)$ совпадают. Таким образом, как и в полубесконечном кристалле, в слое конечной толщины ДПП молекул, связанная с отличием внутрикристаллического поля у поверхности от такового в объеме, не может привести к эллиптической поляризации отраженного света в окрестности угла Брюстера.

Если учесть (9)–(10) в (3), то в его правой части получим внутрикристаллическое поле $\vec{E}^l_s = \vec{E}^{l(*)}_s + \vec{E}^{(e)}$ для слоя толщиной d_3N_3 – это поле в окрестности $\begin{pmatrix} l \\ s \end{pmatrix}$-й молекулы. Если $\vec{E}^l_s$ рассматривать как преломленную волну, распространяющуюся в слое, то её можно представить в виде суперпозиции объемных волн $\vec{E}^{об}_s$ с волновыми векторами $\vec{k} = \left(\vec{k}_\perp, mk_3\right)$ и поверхностных волн $\vec{E}^{пов}_s$ и $\vec{\tilde{E}}^{пов}_s$, распространяющихся вдоль верхней и нижней граней слоя и убывающих с глубиной:

$$\vec{E}^l_s = \vec{E}^{об}_s + \vec{E}^{пов}_s + \vec{\tilde{E}}^{пов}_s, \tag{12}$$

$$\text{где } E^{об}_{s\alpha} = \sum_{m=+,-}\sum_{s'}\varphi^{ss'}_{\alpha\beta}\left(mk_3, \vec{k}_\perp, \omega\right)P_{0s'\beta}\left(\vec{k}_\perp, mk_3\right)\exp\left(imk_3r_3 + i\vec{k}_\perp\vec{r}_\perp - i\omega t\right); \tag{13}$$

$$E^{пов}_{s\alpha} = \sum_{\vec{Q}'_\perp \neq 0}\sum_{s'}\varphi^{ss'(-)}_{\alpha\beta}\left(\vec{Q}'_\perp, \vec{k}_\perp, \omega\right)\vec{B}_{s'\beta}\left(\vec{Q}'_\perp\right)\left[1 + \sum_{n=1}^{l_3-1}\frac{1}{n!}\prod_{i=1}^{n}\left(l_3 - i\right)\right]\exp\left(-\gamma_{q'}r_3 + i\vec{Q}'_\perp\vec{r}_\perp + i\vec{k}_\perp\vec{r}_\perp - i\omega t\right); \tag{14}$$

$$\tilde{E}^{пов}_{s\alpha} = \sum_{\vec{Q}'_\perp \neq 0}\sum_{s'}\varphi^{ss'(+)}_{\alpha\beta}\left(\vec{Q}'_\perp, \vec{k}_\perp, \omega\right)\vec{\tilde{B}}_{s'\beta}\left(\vec{Q}'_\perp\right)\left[1 + \sum_{n=1}^{N_3-l_3}\frac{1}{n!}\prod_{i=1}^{n}\left(N_3 - l_3 - i + 1\right)\right]\times$$
$$\times\exp\left(-\gamma_{q'}\left(r^N_{s3} - r_3\right) - \gamma_{q'}r_{s3} + i\vec{Q}'_\perp\left(\vec{r}^N_{s\perp} - \vec{r}_\perp\right) + i\vec{Q}'_\perp\vec{r}_{s\perp} + i\vec{k}_\perp\vec{r}_\perp - i\omega t\right); \tag{15}$$

$$\varphi_{\alpha\beta}^{ss'(m)}\left(\vec{Q}'_{\perp},\vec{k}_{\perp},\omega\right)=\sum_{g_1,g_2}\left[\sum_{\vec{Q}_{\perp}}\Delta'\exp\left(i\left(\vec{Q}_{\perp}-\vec{Q}'_{\perp}\right)\vec{r}_{ss'\perp}\right)\times\right.$$

$$\left\{\frac{\rho_{\alpha\beta}^{m}\exp\left(\left(\gamma_{q'}+m\gamma_q\right)\left|r_{ss'3}\right|\right)}{1-2\exp\left(\left(\gamma_q-\gamma_{q'}\right)d_3-mi\left(Q'_{\perp 1}-Q_{\perp 1}\right)d_1-mi\left(Q'_{\perp 2}-Q_{\perp 2}\right)d_2\right)}-\rho_{\alpha\beta}^{\mp}\left(1-\delta_{ss'}\right)\exp\left(\left(\gamma_{q'}\mp\gamma_q\right)\times\right.\right.$$

$$\left.\left.\times\left|r_{ss'3}\right|\right)+\frac{2\rho_{\alpha\beta}^{-m}\exp\left(\left(\gamma_{q'}-m\gamma_q\right)\left|r_{ss'3}\right|\right)}{2-\exp\left(\left(\gamma_{q'}+\gamma_q\right)d_3-i\left(Q'_{\perp 1}+mQ_{\perp 1}\right)d_1-i\left(Q'_{\perp 2}+mQ_{\perp 2}\right)d_2\right)}\right\}+\delta_{ss'}\Delta\varphi_{\alpha\beta}^{\perp}\left(\vec{k}_{\perp},\omega\right)\Bigg];$$

$\varphi_{\alpha\beta}^{\perp}\left(\vec{k}_{\perp},\omega\right)$ такие же как в [7]; $\varphi_{\alpha\beta}^{ss'}\left(mk_3,\vec{k}_{\perp},\omega\right)$ получают из $\varphi_{\alpha\beta}^{ss'(-)}\left(\vec{Q}'_{\perp},\vec{k}_{\perp},\omega\right)$ заменой: $\gamma_{q'}\to -imk_3$ и $\vec{Q}'_{\perp}\to 0$. В $\rho_{\alpha\beta}^{\mp}\left(1-\delta_{ss'}\right)\exp\left(\left(\gamma_{q'}\mp\gamma_q\right)\left|r_{ss'3}\right|\right)$ пишем знак «+» при рассмотрении поля на верхней грани (например, если $\vec{r}_{ss'}>0$). Хотя $\varphi_{\alpha\beta}^{ss'(-)}$ и $\varphi_{\alpha\beta}^{ss'(+)}$ различны, но, например, для монослоя $\vec{E}^{поверх}=\tilde{\vec{E}}^{поверх}$.

В (13) можно выделить макроскопическое поле $\vec{E}_0^{макро}=\vec{E}_0^{(*)макро}+\tilde{\vec{E}}_0^{(*)макро}$:

$$E_{0\alpha}^{макро}=-4\pi\frac{\Theta}{a^3}\sum_{s'}\sum_{m=+,-}\frac{\left(k_{\perp\alpha}k_{\perp\beta}+k_3^2\delta_{\alpha 3}\delta_{\beta 3}+mk_{\perp\alpha}k_3\delta_{\beta 3}+mk_{\perp\beta}k_3\delta_{\alpha 3}-k_0^2\delta_{\alpha\beta}\right)}{k^2-k_0^2}\times$$

$$\times\left(1+\exp\left(imk_3d_3\left(N_3-1\right)\right)\right)P_{0s'\beta}\left(\vec{k}_{\perp},mk_3\right),\qquad(16)$$

где $\Theta=1$ для ПК решетки, $\Theta=2$ для ОЦК решетки и $\Theta=4$ для ГЦК решетки.

Макроскопическое поле (16) получено для кристаллического слоя любой конечной толщины (вплоть до мономолекулярного). Таким образом, здесь разработана процедура построения внутрикристаллического поля в сверхтонком слое, где необходимо учитывать дополнительную поляризацию молекул вблизи поверхности. (3) с учетом (12) позволяет разделить волны в кристаллическом слое на объемные и поверхностные волны и определить их законы дисперсии. С другой стороны, если не разделять волны на объемные и поверхностные, то из (3) можно получить внутрикристаллическое поле, коэффициенты которого в длинноволновом разложении изменяются с глубиной, а значит и получить законы дисперсии «объемных» светоэкситонов в ограниченных кристаллах также изменяющиеся с глубиной. Так из (3)-(16) можно получить законы дисперсии светоэкситонов в монослое ($N_3=1$).

Для дипольных моментов (1) рассчитаем в методе Эвальда, обобщенного на двумерно-периодические структуры [7], отраженные $\vec{E}^{(r)}$ и прошедшие $\vec{E}^{(d)}$ через кристаллический слой волны по формулам:

$$\vec{E}^{(r)}=\left[\vec{\nabla}\vec{\nabla}-\frac{a^2}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right]\vec{\Pi}_3\left(\vec{r},t\right)\text{ при }r_3<0,\qquad(17)$$

$$\vec{E}^{(d)}=\vec{E}^{(e)}+\left[\vec{\nabla}\vec{\nabla}-\frac{a^2}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right]\vec{\Pi}_3\left(\vec{r},t\right)\text{ при }r_3>r_3^{N_3}=d_3\left(N_3-1\right),\qquad(18)$$

где вектор Герца

$$\vec{\Pi}_3\left(\vec{r},t\right)=\frac{2\pi}{a^3\Omega_{\perp}}\sum_{s'}\sum_{g_1g_2}\sum_{\vec{Q}_{\perp}}\frac{1}{\gamma_q}\sum_{l'_3=1}^{N_3}\vec{P}_{s'}^{l'_3}\exp\left(-\gamma_q\left|r_3-r_{s'3}^{l'}\right|+i\vec{Q}_{\perp}\left(\vec{r}_{\perp}-\vec{r}_{s'\perp}^{l'}\right)+i\vec{k}_{\perp}\vec{r}_{\perp}-i\omega t\right).$$

С учетом (7)-(8) из (17)-(18) получим $\vec{E}^{(r)}$ (при $r_3\le 0$) и $\vec{E}^{(d)}$ (при $r_3\ge d_3\left(N_3-1\right)$) в виде:

$$E_\alpha^{(r)} = -\sum_{s'}\sum_{g_1,g_2}\sum_{\vec{Q}_\perp}\rho^{+}_{\alpha\beta}\exp\left(-\gamma_q r_{s'3} + i\vec{Q}_\perp(\vec{r}_\perp - \vec{r}_{ss'\perp}) + \gamma_q r_3 + i\vec{k}_\perp\vec{r}_\perp - i\omega t\right)\times$$

$$\times\left[\sum_{m=+,-}\frac{\Delta\exp(imk_3 r_{s'3})P_{0s'\beta}(\vec{k}_\perp, mk_3)}{1-\exp\left((imk_3-\gamma_q)d_3 - iQ_{\perp 1}d_1 - iQ_{\perp 2}d_2\right)} + \right.$$

$$+\sum_{\vec{Q}'_\perp\neq 0}\Delta'\exp\left(-\gamma_{q'}r_{s'3} + \vec{Q}'_\perp\vec{r}_{s'\perp}\right)\left\{\frac{B_{s'\beta}(\vec{Q}'_\perp)}{1-2\exp\left(-(\gamma_q+\gamma_{q'})d_3 + i(Q'_{\perp 1}-Q_{\perp 1})d_1 + i(Q'_{\perp 2}-Q_{\perp 2})d_2\right)} + \right.$$

$$\left.\left.+\frac{2^{N_3}\widetilde{B}_{s'\beta}(\vec{Q}'_\perp)\exp\left(-\gamma_{q'}d_3(N_3-1) + i(Q'_{\perp 1}d_1 + Q'_{\perp 2}d_2)(N_3-1)\right)}{2-\exp\left((\gamma_{q'}-\gamma_q)d_3 - i(Q'_{\perp 1}+Q_{\perp 1})d_1 - i(Q'_{\perp 2}+Q_{\perp 2})d_2\right)}\right\}\right]; \qquad (19)$$

$$E_\alpha^{(d)} = -\sum_{s'}\sum_{g_1,g_2}\sum_{\vec{Q}_\perp}\rho^{-}_{\alpha\beta}\exp\left(\gamma_q r_{s'3} + i\vec{Q}_\perp(\vec{r}_\perp - \vec{r}_{ss'\perp}) - i(Q_{\perp 1}d_1 + Q_{\perp 2}d_2)(N_3-1) - \gamma_q(r_3 - \right.$$

$$\left.-d_3(N_3-1)) + i\vec{k}_\perp\vec{r}_\perp - i\omega t\right)\left[\sum_{m=+,-}\frac{\Delta\exp(imk_3 r_{s'3})P_{0s'\beta}(\vec{k}_\perp, mk_3)\exp(imk_3 d_3(N_3-1))}{1-\exp\left(-(imk_3+\gamma_q)d_3 + iQ_{\perp 1}d_1 + iQ_{\perp 2}d_2\right)} + \right.$$

$$+\sum_{\vec{Q}'_\perp\neq 0}\Delta'\left\{\frac{2^{N_3}B_{s'\beta}(\vec{Q}'_\perp)\exp\left(-\gamma_{q'}d_3(N_3-1) + i(Q'_{\perp 1}d_1 + Q'_{\perp 2}d_2)(N_3-1)\right)}{2-\exp\left((\gamma_{q'}-\gamma_q)d_3 - i(Q'_{\perp 1}-Q_{\perp 1})d_1 - i(Q'_{\perp 2}-Q_{\perp 2})d_2\right)} + \right.$$

$$\left.\left.+\frac{\widetilde{B}_{s'\beta}(\vec{Q}'_\perp)}{1-2\exp\left(-(\gamma_{q'}+\gamma_q)d_3 + i(Q'_{\perp 1}+Q_{\perp 1})d_1 + i(Q'_{\perp 2}+Q_{\perp 2})d_2\right)}\right\}\exp\left(-\gamma_{q'}r_{s'3} + \vec{Q}'_\perp\vec{r}_{s'\perp}\right)\right]. \qquad (20)$$

Поля (19) и (20) представляют суперпозицию макрополей ($\vec{Q}_\perp = 0$) и коротковолновых полей ($\vec{Q}_\perp \neq 0$). В (19) и (20) как в макрополе, так и в коротковолновых полях есть слагаемые, экспоненциально убывающие с удалением от поверхности и связанные с ДПП молекул, что приводит к искажению отраженных и прошедших волн вблизи поверхности кристалла. Кроме того, это искажение зависит от структуры поверхности – типа поверхностной кристаллографической плоскости, так как параметры в (19)-(20) и ДПП молекул зависят от индексов Миллера.

Та как процедура усреднения поля в тонком слое сложна [5], а в моноатомном слое невозможна, то рекомендуется применять микроскопическую теорию для изучения распространения света в сверхтонком кристаллическом слое. С математической точки зрения кристаллический слой любой толщины (вплоть до молекулярной) должен иметь одинаковую структуру. Применив к таким объектам микротеорию, получим одинаковые результаты: макрополя; теоремы погашения Эвальда-Озеена; граничные условия; формулы Френеля; одинаковые законы дисперсии светоэкситонов.

Взаимодействие электромагнитной волны со сверхтонким кристаллическим слоем

Микроскопическая теория не дает отклонений от макроскопической теории при рассмотрении распространении света в сверхтонком кристаллическом слое. Из (9), (12), (19) и (20) следует, что в любом узле и в междоузлии на верхней грани $\vec{E}^{(e)} + \vec{E}^{(r)} = \vec{E}$,а на нижней грани $\vec{E}^{(d)} = \vec{E}$. Откуда получим граничные условия Максвелла, связывающие амплитуды макрополей на гранях:

$$E_{0\alpha}^{(e)макро} + E_{0\alpha}^{(r)макро} = E_{0\alpha}^{(*)макро} + 4\pi\Theta\delta_{\alpha 3}\delta_{\beta 3}\sum_{s'}\sum_{m=+,-}P_{0s'\beta}(\vec{k}_\perp, mk_3); \qquad (21)$$

$$E_{0\alpha}^{(d)макро} = \widetilde{E}_{0\alpha}^{(*)макро} + 4\pi\Theta\delta_{\alpha 3}\delta_{\beta 3}\sum_{s'}\sum_{m=+,-}P_{0s'\beta}(\vec{k}_\perp, mk_3)\exp(imk_3 d_3(N_3-1)), \qquad (22)$$

где $E_{0\alpha}^{(e)макро} = \tilde{\rho}^{+}_{\alpha\beta} \sum_{s'} \sum_{m=+,-} \frac{P_{0s'\beta}\left(\vec{k}_{\perp}, mk_3\right)}{k_{03}\left(mk_3 - k_{03}\right)}$; $E_{0\alpha}^{(r)макро} = -\tilde{\rho}^{-}_{\alpha\beta} \sum_{s'} \sum_{m=+,-} \frac{P_{0s'\beta}\left(\vec{k}_{\perp}, mk_3\right)}{k_{03}\left(mk_3 + k_{03}\right)}$;

$E_{0\alpha}^{(d)макро} = \tilde{\rho}^{+}_{\alpha\beta} \sum_{s'} \sum_{m=+,-} \frac{P_{0s'\beta}\left(\vec{k}_{\perp}, mk_3\right)}{k_{03}\left(mk_3 - k_{03}\right)} \exp\left(imk_3 d_3 \left(N_3 - 1\right)\right)$; $\tilde{\rho}^{m}_{\alpha\beta} = -2\pi \frac{\Theta}{a^3}\left(k_{\perp\alpha}k_{\perp\beta} + \right.$

$\left. + k_{03}^2 \delta_{\alpha 3}\delta_{\beta 3} + mk_{\perp\beta}k_{03}\delta_{\alpha 3} + mk_{\perp\alpha}k_{03}\delta_{\beta 3} - k_0^2 \delta_{\alpha\beta}\right)$.

Граничные условия (21) – (22) получены из микроскопической теории, они одинаковы для слоя любой толщины (вплоть до мономолекулярного ($N_3 = 1$)) и такие же как для полубесконечного кристалла [8].

Если учесть многократные отражения волн внутри кристаллического слоя [6], то из (9), (19) – (20) получим амплитуды прошедших $E_0^{(d)}$, отраженных $E_0^{(r)}$ на слое и падающей $E_0^{(e)}$ на его поверхность волны:

$$E_0^{(r)} = -2\pi \frac{\Theta}{a^3} \frac{\cos(\varphi + \psi)\sin\psi}{\sin(\varphi + \psi)\cos\varphi} \frac{1 - \exp\left(2ik_3 d_3 \left(N_3 - 1\right)\right)}{1 - R^2 \exp\left(2ik_3 d_3 \left(N_3 - 1\right)\right)} \sum_{s'} P_{0s'}\left(\vec{k}\right) + o\left(\frac{a}{\lambda}\right); \tag{23}$$

$$E_0^{(d)} = 2\pi \frac{\Theta}{a^3} \frac{\cos(\varphi - \psi)\sin\psi}{\sin(\varphi - \psi)\cos\varphi} \frac{1 - R^2 \exp\left(-2ik_3 d_3\right)}{1 - R^2 \exp\left(2ik_3 d_3 \left(N_3 - 1\right)\right)} \exp\left(\left(ik_3 - ik_{03}\right)d_3 N_3\right) \sum_{s'} P_{0s'}\left(\vec{k}\right) + o\left(\frac{a}{\lambda}\right); \tag{24}$$

$$E_0^{(e)} = 2\pi \frac{\Theta}{a^3} \frac{\cos(\varphi - \psi)\sin\psi}{\sin(\varphi - \psi)\cos\varphi} \sum_{s'} P_{0s'}\left(\vec{k}\right) + o\left(\frac{a}{\lambda}\right), \tag{25}$$

где φ – угол падения; ψ – угол преломления; $R = \frac{\cos(\varphi + \psi)\sin(\varphi - \psi)}{\sin(\varphi + \psi)\cos(\varphi - \psi)}$. Формулы (23)–(25) получены для p – поляризованных волн, лежащих в плоскости падения. Для s – поляризованных волн в этих формулах необходимо сделать замены $\cos(\varphi \pm \psi) \to 1$.

$E_0^{(r)}$, $E_0^{(d)}$ и $E_0^{(e)}$ в членах порядка a/λ зависят от структуры поверхности и ДПП молекул. Из (9), (19), (20), (23) – (25) можно получить формулы Френеля для сверхтонкого кристаллического слоя с точностью до членов $\sim a/\lambda$:

$$\frac{E_0^{(r)}}{E_0^{(e)}} = ik_0 B; \quad \frac{E_0^{(d)}}{E_0^{(e)}} = 1 + ik_0 B, \tag{26}$$

где $B = \sin\varphi \cdot ctg\psi \frac{2R}{1 - R^2}\left[d_3 + 2d_3 b^{(0)} + H\right]$; $H = d_3\left(N_3 - 1\right)$ – толщина слоя (для монослоя $N_3 = 1$ и $H = 0$); $b^{(0)} = \sum_{s'} \sum_{g_1, g_2} \sum_{\vec{Q}_{\perp} \neq 0} \frac{\Delta P_{0s'}\left(\vec{k}\right)}{\sum_{s'} P_{0s'}\left(\vec{k}\right)} V_{s'}\left(\vec{Q}_{\perp}, N_3\right)\left[\frac{1}{1 - 2\exp\left(-\left|\vec{Q}_{\perp}\right|d_3 + iQ_{\perp 1}d_1 + iQ_{\perp 2}d_2\right)} + \right.$

$\left. + \frac{2^{N_3} \exp\left(-\left|\vec{Q}_{\perp}\right|d_3\left(N_3 - 1\right) + iQ_{\perp 1}d_1\left(N_3 - 1\right) + iQ_{\perp 2}d_2\left(N_3 - 1\right)\right)}{2 - \exp\left(\left|\vec{Q}_{\perp}\right|d_3 - iQ_{\perp 1}d_1 - iQ_{\perp 2}d_2\right)}\right] \exp\left(-\left|\vec{Q}_{\perp}\right|r_{s'3} + i\vec{Q}_{\perp}\vec{r}_{s'\perp}\right)$.

Для монослоя и сверхтонкого кристаллического слоя ($H << \lambda$) имеет место помимо граничных условий (21)-(22) равенство $\vec{E}^{(e)} + \vec{E}^{(r)} = \vec{E}^{(d)}$ (с точностью до членов $\sim a/\lambda$). Оно нарушается для толстого слоя. Так как при $N_3 = 1$ $\vec{E}^{(r)} \sim a/\lambda$, то поле сверху и снизу от монослоя изменяется на величину a/λ. Если учесть в (23)-(25) члены порядка $\left(a/\lambda\right)^2$, то получим выполнение закона сохранения энергии:

$\left|\vec{E}^{(e)}\right|^2 = \left|\vec{E}^{(r)}\right|^2 + \left|\vec{E}^{(d)}\right|^2$ с точностью до членов $\sim\left(a/\lambda\right)^2$. Отражательная способность сверхтонкого кристаллического слоя $R = \left|E_0^{(r)}\right|^2 \Big/ \left|E_0^{(e)}\right|^2 = k_0^2 B^2$.

Таким образом, значения коэффициентов $E_0^{(r)}/E_0^{(e)}$ и $E_0^{(d)}/E_0^{(e)}$ и отражательная способность сверхтонкого кристаллического слоя зависят от его поверхностной структуры, они изменяются для поверхностей с различными индексами Миллера.

Заключение

В работе проведено обобщение метода Эвальда на сверхтонкий кристаллический слой с учетом дополнительной поверхностной поляризаций его молекул. Это позволило рассчитать внутрикристаллическое поле, разделить его на объемные и поверхностные волны и разработать процедуру выделения макрополя в сверхтонком кристаллическом слое. Развиваемая в работе микроскопическая теория будет использована в дальнейшем для исследования законов дисперсии «объемных» и «поверхностных» светоэкситонов в таких кристаллических структурах. Полученные в микроскопической теории отраженные, преломленные и прошедшие через слой волны, коэффициенты отражения и пропускания света связаны с ДПП молекул и структурой поверхности – они различны для кристаллов с разными равновесными гранями. Результаты работы свидетельствуют, что макроскопическую теорию можно «формально» применять к исследованию распространения света в слоистом кристалле или кристаллическом слое любой толщины (вплоть до мономолекулярной), так как в методе действующего поля получаются такие же граничные условия, формулы Френеля и др. [9]. Лишь в конечных формулах нужно учитывать поправки $\sim a/\lambda$, связанные с ДПП молекул и структурой поверхности. Наиболее существенны они в законах дисперсии светоэкситонов и при исследовании распространения света в сверхтонких кристаллических слоях, где и необходимо применять микроскопическую теорию для оценки параметров.

РЕЗЮМЕ

Проведено узагальнення методу Евальда на надтонкий кристалічний шар. У методі діючого поля урахована додаткова поверхнева поляризація молекул і досліджені хвилі у шарі та по обидва боки від нього. Одержані граничні умови та коефіцієнти відбиття і пропускання хвиль для таких кристалічних структур.

SUMMARY

The generalization of a method Ewald on a superthin crystal layer is received. In a method of a local field the additional surface polarization of molecules is taken and the waves in a layer and till both parties from it are investigated. The boundary conditions and factors of reflection and passing of waves for such crystal structures are received.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. – М.: Наука, 1970. – 856 с.
2. Ярив А., Юх П. Оптические волны в кристаллах. – М.: Мир, 1987. – 616 с.
3. Сугаков В.И. Экситоны и электроиагнитные волны в тонких пластинках // ФТТ. – 1964. – Т.6, №5. – С.1361-1368.
4. Redlack A., Grindlay J. Jhe electromagnetic field in crystalline slab // J. Phys. Chem. Solids. – 1980. – V.41. – P.875-886.
5. Румянцев В.В. Взаимодействие электромагнитного излучения и легких частиц с несовершенными кристаллическими средами. – Донецк: Норд-Пресс, 2006. – 347 с.
6. Латинін С.М. Мікроскопічна теорія відбиття та заломлення хвиль на шаруватих кристалах // УФЖ. – 2001. – Т.46, №1. – С.88–93.
7. Латинін С.М. До питання про існування рівноважних граней у кубічних кристалах // УФЖ. – 2001. – Т.46, №9. – С.932–936.
8. Латынин С.Н. К вопросу о граничных условиях в кристаллооптике // Вісник Донецького університету, Сер.А.– 2006. – №2. – С.155–159.
9. Myasnikov V.N., Marisova S.N., Lipovchenko A.N. Optical Properties of Polaritons in Thin Crystal Films // Phys. Status Solidi (b). – 1983. – V.117, N1. – P.109-116.

Надійшла до редакції 20.09.2007 р.

УДК 536: 539.312 : 621.7

ЛАНДАУ ТЕОРИЯ ИПД С УЧЕТОМ УПРОЧНЕНИЯ И НЕОДНОРОДНОСТИ

Л.С.Метлов,
Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина НАН Украины

Введение

В результате обработки металлов методами интенсивной пластической деформации (ИПД) формируется мелкая микродисперсная структура зерен с линейным размером порядка 100нм, благодаря которой материал приобретает уникальные физические и механические свойства. К настоящему времени известны три попытки теоретического описания процесса интенсивной пластической деформации. Теория фрагментации дислокационных структур Г.А. Малыгина, которая, фактически, описывает формирование высокоугловых границ зерен при больших пластических деформациях, базируется на механизме деформирования, в основу которого положены представления о самоорганизации дислокаций [1-3]. Изгибные и крутящие деформации и напряжения, возникающие в процессе равноканального углового прессования, приводят к генерации большого количества геометрически необходимых дислокаций, поведение которых, однако, после того как они возникли, ничем не отличается от поведения хаотически возникших дислокаций. Автор, фактически, распространил идеи, которые он развил ранее для описания формирования ячеистой структуры [4], на описание формирования более крупного дефекта, каковым является граница зерна. Это несколько нарушает иерархическую последовательность событий, поскольку было бы более логично представить формирование границ зерен в результате самоорганизации ячеистых структур, а не элементарных дислокаций. На 4-й и 5-й стадии упрочнения материала [1] вновь формируемая структура должна пересекать несколько элементарных дислокационных ячеек, сохранив при этом некоторую целостность. Можно положить, что дислокациям более выгодно покинуть объем дислокационной ячейки или зерна и «осесть» на их границах, повысив тем самым уровень их избыточной энергии (неравновесности) и только потом формировать новую границу, как процесс релаксации избыточной энергии границ.

Теория диспергирования материала в процессе ИПД В.И. Копылова, В.Н. Чувильдеева [5-8] базируется на конкретном механизме деформирования, в основу которого положены представления о межграничном проскальзывании и аномально высокой диффузии по границам зерен. Кроме того, в основу теории положены представления о свободном объеме, заимствованными из теории аморфных материалов. В тоже время, экспериментальными работами В.А. Хоника [9, 10] поставлено под серьезное сомнение тот факт, что свободный объем можно использовать как определяющий термодинамический параметр для описания аморфных сплавов, по крайней мере, в той классической трактовке, которая принята в подавляющем большинстве работ. Действительно, избыточный объем есть мера увеличения среднего расстояния между атомами, что приводит к росту средней потенциальной энергии тех атомов, которые разошлись на расстояние большего равновесного. Однако в твердом теле увеличение расстояния между одними атомами в силу замкнутости силовых линий неизбежно влечет за собой уменьшение расстояний между другими атомами (локальное сжатие). Причем, поскольку потенциальная энергия отталкивания атомов меняется значительно более резко, чем потенциальная энергия слабого Ван дер-Ваальсовского притяжения, то при меньшем изменении объема за счет сжатия, потенциальная энергия, запасенная в этой области, может существенно превосходить потенциальную энергию, запасенную в области избыточного свободного объема. Поэтому очень важно в теории учитывать не только избыточный свободный объем, но и не достающий «спрессованный объем», чего до настоящего времени никто не делал. Кроме того, в докладе Глезера [11] было сообщено, что свободный объем имеет, по крайней мере, двухмодовую структуру по размерам – аморфные материалы с более мелкоструктурированным свободным объемом являются более пластическими, а с более крупноструктурированным свободным объемом, более хрупкими, для которых очевидно соотношение между свободным и спрессованным объемом будет различным.

К тому же, роль собственно диффузионного массопереноса кажется преувеличенной. На самом деле, с нашей точки зрения, под действием избыточной энергии неравновесной границы и, связанных с нею внутренних напряжений, идет перестройка структуры материала, и границы зерен в этом активно участвуют. Граница существенно облегчает такую перестройку, обеспечивая дополнительные степени свободы. При этом попутно осуществляется и массоперенос, но он не связан напрямую с избыточной концентрацией атомов.

Кроме того, в настоящее время известна инженерная теория [12, 13], которая исходит из простых механических представлений на процесс деформирования. Система кинетических уравнений конструируется на основании обобщения экспериментальных результатов и закономерностей. В рамках этой теории, не удается объяснить многие важные особенности процесса ИПД, и, в частности, она не может описать формирование «предельной» структуры металлов – минимального среднего размера зерна. Чтобы

© Метлов Л.С.

как-то описать фрагментацию зерен в теорию «руками» вводится некоторый притягивающий аттрактор, заставляющий систему стремиться к состоянию с нужным (заданным) размером зерна.

В то же время, логично предположить, что достижение предельного размера зерна в результате диспергирования в процессе ИПД является общим свойством достижения материалом стационарного состояния и может быть исследовано в самом общем виде независимо от конкретного механизма деформирования. В работах автора [14-19] была предложена общая теория процесса ИПД, в основу которой положена мезоскопическая неравновесная термодинамика. Формирование предельной структуры в рамках этой теории связывается с минимумом или максимумом термодинамического потенциала, и строится по аналогии с теорией фазовых переходов на базе общего кинетического уравнения типа Ландау-Халатникова [14-19]. Особенностью данного подхода является то, что, в то время как, обычная термодинамика является бесструктурной теорией, здесь по аналогии с мезоскопической термодинамикой [19, 20] дефектная структура учитывается, путем явного введения соответствующих слагаемых в базовые термодинамические соотношения. Мезоскопичность модели понимается в том, что структурными элементами среды в таком рассмотрении могут быть достаточно крупные образования типа зерен, границ зерен, скоплений дислокаций и т.д.

Общие соотношения.

Базовым термодинамическим соотношением в рассматриваемом подходе является некоторое термодинамическое тождество, которое включает в себя первый и второй законы термодинамики [14-19]. Запишем его здесь в форме:

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^{e} + Tds + \chi ds' + \sum_{l=1}^{N_d} \varphi_l dh_l \,, \qquad (1)$$

где u – плотность внутренней энергии, σ_{ij} – тензор напряжений ε_{ij}^{e} – упругая часть тензора деформаций, T, s – температура и полная (от внешних и внутренних источников) равновесная энтропия, χ, s' – неравновесная температура и неравновесная энтропия только от внутренних источников, φ_l, h_l – энергия и плотность структурных дефектов l-типа. Суммирование осуществляется по всем видам структурных дефектов N_d, имеющихся в объеме твердого тела. В конкретных задачах может оказаться достаточным учитывать один или два типа дефектов. Общее число каналов диссипации работы внешних сил, включая тепловой, равно $N_d + 1$.

При таком рассмотрении внутренняя (а не свободная) энергия u является основной фундаментальной величиной, относительно которой строится вся система определяющих соотношений и уравнений. Обобщенное состояние системы задается набором параметров $-\varepsilon_{ij}^{e}$, s, s' и h_i, то есть, $u = u\left(\varepsilon_{ij}^{e}, s, s', h\right)$. Упругая часть тензора деформаций – это та часть полной деформации материала, которая обращается в нуль после прекращения действия внешней силы (напряжений). При пластическом деформировании она может определяться двумя факторами – скоростью деформирования и прочностью материала (пределом пластичности). Скорость деформирования в большинстве установок ИПД поддерживается постоянной, поэтому величина ε_{ij}^{e} зависит только от упрочнения материала в процессе ИПД.

Влияние упрочнения на фрагментацию зерен металла в процессе ИПД.

Согласно [18] преобразованием Лежандра по каждой паре термодинамических переменных можно получить три вида свободной энергии. Свободная энергия, определенная преобразованием Лежандра только по тепловым переменным $f = u - Ts$, в отношении дефектности качественно ведет себя так же, как и внутренняя энергия, а именно, стационарные точки системы определяются максимумами этих энергий. Графики свободной энергии от плотности дефектов при постоянной температуре и различных постоянных значениях ε_{ij}^{e} будут образовывать некоторое параметрическое семейство (Рис. 1). Здесь $N_d = 1$, то есть рассматривается простейший вариант задачи с одним видом дефекта, в качестве которого фигурируют границы зерен. В этом случае мерой дефектности h логично выбрать плотность поверхности границ зерен. Ранее полагалось, что эволюция системы к экстремальным значениям внутренней энергии осуществляется в соответствии с уравнениями типа Ландау-Халатникова вдоль одной и той же кривой из этого семейства, то есть, при постоянном управляющем параметре ε_{ij}^{e} [14-19]. Это возможно в двух случаях, когда материал не упрочняется и деформируется с постоянной скоростью или упрочняется, но скорость деформирования меняется соответст-

вующим образом. Если материал упрочняется и деформируется с постоянной скоростью, то невозможно оставаться на одной и той же параметризированной кривой и процесс эволюции материала на разных стадиях будет описываться различными кривыми. Переход от одной кривой к другой кривой при постоянной скорости деформирования задается законом упрочнения материала. Поэтому систему эволюционных уравнений необходимо дополнить соотношением, связывающим управляющий параметр с достигнутым уровнем необратимых пластических деформаций.

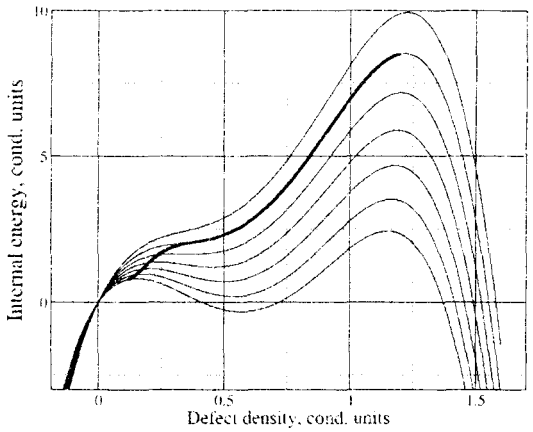


Рис. 1. Графики внутренней энергии от плотности дефектов: жирная кривая соответствует эволюции материала с учетом упрочнения

Возьмем за основу обычный для поликристаллов квадратичный закон упрочнения материала [22]

$$\sigma = \sigma_0 + AG\sqrt{\varepsilon}, \tag{2}$$

где σ – текущий предел текучести, σ_0 – предел текучести в начальном состоянии, G – сдвиговый модуль упругости, A – коэффициент пропорциональности, ε – полный тензор деформаций, который, практически, полностью состоит из пластической части. Поскольку в принятых здесь обозначениях управляющим параметром является упругая часть деформации, которая пропорциональна действующему напряжению, то соотношение (2) можно переписать в виде:

$$\varepsilon^e = \varepsilon_0^e + B\sqrt{\varepsilon^p}, \tag{3}$$

где B – итоговый коэффициент пропорциональности. Это соотношение описывает упрочнение для не слишком больших деформаций. Для больших значений деформаций этот закон дает хоть и медленный, но не ограниченный рост прочности материала, в то время, как для реальных материалов он выходит на предельное постоянное значение. Для качественного описания закона упрочнения, как при малых, так и при больших пластических деформациях единой формулой выразим его через гиперболический тангенс:

$$\varepsilon^e = \varepsilon_0^e + B\tanh\left(a\varepsilon^p\right), \tag{4}$$

где B и a – некоторые эмпирические параметры, которые характеризуют вещество. Эта зависимость тем хороша, что при малых деформациях она качественно ведет себя как корень квадратный, а при больших деформациях выходит на постоянное значение.

Условие упрочнения материала типа (2)-(4) играет, как бы роль эволюционного уравнения для параметра ε_{ij}^e. Однако, оно не следует из обычной процедуры дифференцирования термодинамического потенциала в форме внутренней или свободной энергии, и в этом, кажется, есть некоторое противоречие общим принципам теории. Оно связано с тем, что упрочнение определяется дефектностью материала на дислокационном уровне, а основным изучаемым дефектом в процессе ИПД, являются границы зерен. Поскольку явный учет в рамках одной теории двух существенно различных структурных уровней задача значительно более сложная, то на данной стадии изучения процесса ИПД, пришлось воспользоваться «готовым» эмпирическим (или следующим из другой теории упрочнения) соотношением. С другой стороны, соотношения (2)-(4) показывают – каким образом можно управлять «управляющими параметрами».

Полагая, что в начальном состоянии материал находился в крупнозернистом состоянии (малые значения $h > 0$ на рис. 1), то в результате упрочнения он будет переходить к кривым, соответствующим большим значениям ε_{ij}^e и зависимости от величины коэффициента пропорциональности B перейдет к левому или правому максимуму свободной энергии. Например, жирная кривая на рис. 1 соответствует эволюции системы в процессе пластического деформирования. Можно отметить, что на начальной стадии, когда скорость

упрочнения значительна, система переходит от одной параметрической кривой к другой в области максимума свободной энергии. То есть, идет медленная эволюция системы, во время которой состояние системы остается близким к ее стационарным состояниям. Начиная с какого-то момента времени, эволюционная кривая «садится» на одну из параметрических кривых и дальше остается на ней. К этому моменту закон упрочнения выходит на асимптотическое значение, и система эволюционирует при постоянном значении напряжения (или при постоянном значении ε_{ij}^{e}) так, как это рассматривалось в работах [14-19].

Эволюция системы во времени приведена на рис. 2. При малых значениях коэффициента B эволюция системы «заканчивается» на первом максимуме свободной энергии. Материалы, которые слабо упрочняются, не могут сформировать мелкозернистой структуры (при условии, что остальные параметры материала такие же, какие выбраны для рассматриваемого случая – существует потенциальный барьер между максимумами свободной энергии). При больших значениях коэффициента B эволюция системы переходит на второй максимум свободной энергии. По-сути, этот переход и есть ИПД. Материал, который упрочняется более быстро, соответственно, быстрее достигает предельной (или стационарной) структуры. Причем, чем быстрее упрочняется материал, тем более мелкое зерно (выше плотность дефектов) формируется в результате ИПД. Однако, различия эти не столь существенны в процентном отношении по сравнению с различиями в размерах зерен, соответствующих первому (левый максимум свободной энергии) и второму (правый максимум) стационарному состоянию материала. Важный вывод, который, кстати, качественно согласуется с выводом теории [12] – для того, чтобы в большей степени измельчить материал, необходимо повысить его сопротивление деформации, более прочный материал в то же время более мелко дробится.

Зависимость характера эволюции структуры материала от второго параметра закона упрочнения a приведена на рис. 3 для случая малого B . Она оказывается менее существенной. При больших значениях этого параметра материал быстрее выходит на предельное значение плотности дефектов, но величина этого предела одна и та же для разных a .

Как видно из рис. 2 переход из крупнозернистого в мелкозернистое состояние осуществляется достаточно быстро, что оправдывает применение термина интенсивных пластических деформаций, а не просто больших деформаций, как это иногда предлагается в литературе. Кроме того, из теории следует, что исходное крупнозернистое состояние также является предельной (или стационарной) структурой, так же как ранее было принято считать только по отношению к конечному состоянию после ИПД. В пределах обычной (не интенсивной) пластичности материал также немного модифицируется, если его начальное состояние оказывается отличным от стационарного (см. кривые на рис. 3 и нижние участки кривых на рис. 2), но скорость процесса будет относительно не высокой. Поэтому крупнозернистое строение можно рассматривать как стационарную структуру, формирующуюся в процессе обычной пластичности. Связь параметра h со средним размером зерен зависит от формы последних. Полагая для простоты: что зерна имеют форму куба, для оценки его линейного размера l получим простое выражение $l=3/h$. Вследствие обратной зависимости $d \sim 1/h$ между размером зерна d и плотностью дефектов h большому разбросу размеров зерен Δd будет соответствовать малый разброс плотности дефектов $|\Delta h| \sim \Delta d/d^2$, то есть, практически все крупнозернистые материалы попадают в область левого максимума внутренней энергии. Кроме того, по этой же причине скорость эволюции системы к точному значению этого максимума будет не высокой и тем меньшей, чем крупнее исходный размер зерен. То есть, обычная пластичность слабо модифицирует дефектную подсистему (границы зерен), что, фактически, и наблюдается на реальном материале.

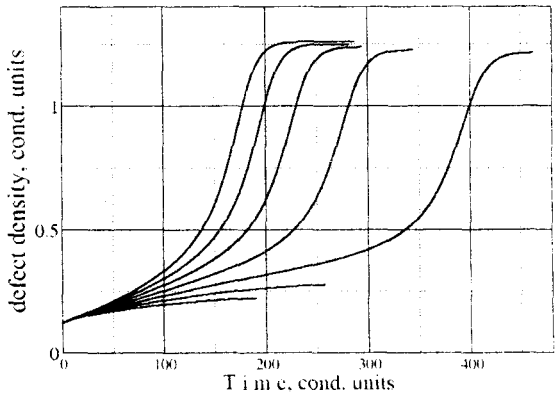


Рис. 2. Зависимость эволюции плотности дефектов во времени от коэффициента B .
Нижние кривые соответствуют меньшим значениям коэффициента

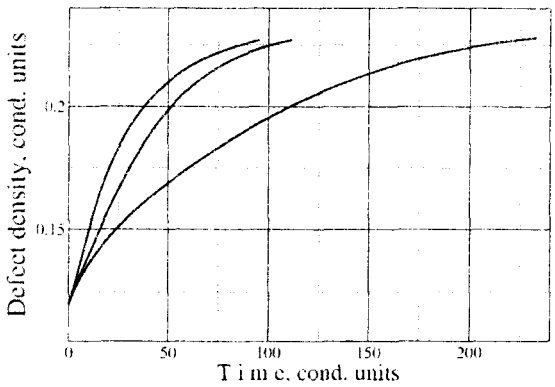


Рис. 3. Зависимость эволюции плотности дефектов во времени от коэффициента a. Левые кривые соответствуют большим значениям коэффициента

Роль неоднородности «напряженного состояния» в протекании ИПД.

До этого молчаливо предполагалось, что деформация в процессе ИПД протекает однородно. Фактически, имеются методы ИПД, в которых именно так и происходит [23, 24]. Однако, в этих методах пространственная однородность достигается за счет необратимого изменения сечения образца, что в конечном итоге, приводит к ограничению процесса во времени. Из этого следует, что достижение строго стационарного состояния (неограниченного во времени) для этих варрантов ИПД не возможно. Однако на ограниченном промежутке времени состояние дефектной подсистемы может быть близким к стационарному.

В классических методах ИПД таких, как равноканальное угловое (РКУ) прессование [25-29], винтовая экструзия [13] и т.д. сечение образца в процессе обработки не меняется. Однако, стационарное состояние не может быть достигнуто по другой причине – образец деформируется только на ограниченном промежутке времени, пока он проходит активную зону. В остальной части установки ИПД образец находится в упругом (сжатом) состоянии, и просто перемещается вдоль оси установки. В активной зоне пластическая деформация, возникающая под действием самосогласованно сформированных упругих напряжений, распределена не равномерно, возрастая от нуля до некоторого максимального значения, и убывая затем снова до нуля (вернее, до напряжения ниже предела текучести). Такое распределение упругих напряжений, и соответствующих им упругих деформаций, имеет характер стационарной волны, через которую последовательно проходит весь образец. Еще эту волну с термодинамической точки зрения можно сравнить с ударной волной, у которой впереди фронта материал находится в одном структурном состоянии (крупнозернистое строение), а после в другом структурном состоянии. В каждый момент деформирования материал стремится к стационарному состоянию, которое само определяется теми конкретными внешними управляющими параметрами, действующими в данный момент. Поэтому за время одного цикла обработки ИПД материал не успевает достигнуть своего стационарного состояния, соответствующего мелкозернистому строению (правый максимум свободной энергии), а проходит только часть этого пути. Поэтому возникает необходимость многократного повторения такой обработки. По этой причине возникает необходимость так обобщить метод мезоскопической неравновесной термодинамики, чтобы можно было учесть неоднородность процесса деформирования.

Ранее на основании однородного функционала Ландау-Халатникова была развита качественная теория интенсивных пластических деформаций [14-19], которая позволила объяснить формирование предельной (стационарной) зеренной структуры металлов в процессе обработки их методами ИПД с позиций фазового перехода первого рода. Однако в силу однородности функционала интерпретация эксперимента носила качественный характер. Неоднородность модели может быть учтена с привлечением параболического функционала Гинзбурга-Ландау. С точностью до несущественной постоянной плотность свободной энергии f можно записать в виде некоторого разложения [30, 31]:

$$f(h)=c(\nabla h)^2+\varphi_0 h-\frac{1}{2}\varphi_1 h^2+\frac{1}{3}\varphi_2 h^3-\frac{1}{4}\varphi_3 h^4+\ldots, \qquad (5)$$

где h – плотность площади границ зерен (статическая энтропия), φ_i – константы теории, зависящие от напряжений (или упругих деформаций) и температуры, $k=0,1,\ldots\infty$. Соответствующее эволюционное уравнение легко получить из вариационного принципа.

На рис. 1 приведен график изменения плотности дефектов (плотности границ зерен) в процессе трехкратной такой обработки, рассчитанный в соответствии с представленной теорией. Изменение

управляющего параметра в активной зоне задано в виде движущейся с постоянной скоростью «ударной волны» в форме:

$$\varepsilon_{ij}^{e} = \frac{A}{1 + B(x - Vt)^2}, \qquad (6)$$

где A и B – некоторые новые константы, V – скорость прохождения образца через установку ИПД (скорость перемещения активной зоны).

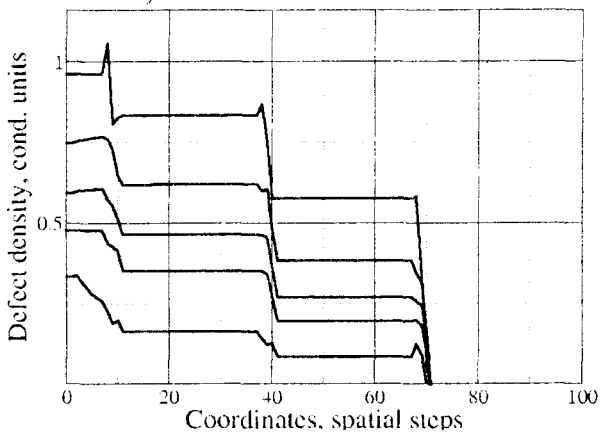


Рис. 4. Рост дефектности материала h с увеличением номера цикла обработки по методу ИПД. Нижние кривые соответствуют большим значениям константы c

Пластическое течение включается, когда упругая деформация превосходит предел текучести. Нулевые значения дефектности $h = 0$ соответствуют состоянию материала до обработки – состоянию с наиболее крупным зерном. Каждая последующая ступенька соответствует состоянию материала после каждого цикла обработки ИПД. Видно, что на каждом последующем цикле обработки дефектность возрастает, однако, с увеличением номера цикла все на меньшую величину, стремясь к некоторому стационарному значению.

Верхняя кривая соответствует нулевому значению c, то есть однородной задаче. Изменение дефектности материала происходит скачком за время прохождения материала через активную зону деформирования. Для удобства сопоставления на графике изображены последовательные прохождения образца через три такие зоны, хотя на практике в силу кинематических особенностей на каждом цикле образец может подвергнуться такой обработке только один раз. Учет неоднородности при положительном значении $c > 0$ приводит к уменьшению величины скачков и к сглаживанию переходных процессов на момент входа и выхода образца из активной зоны. Уменьшение уровня дефектности можно вязать с тем, что неоднородность (а она диффузионного типа) приводит к уходу дефектов из активной зоны, чем достигается уменьшение эффективности концентрации напряжений. При этом происходит формирование однородной вдоль оси образца дефектной (зеренной) структуры,

Другие мезоскопические эффекты.

Кроме ИПД теория может быть применена для описания целого ряда других мезоскопических эффектов. Еще раньше вариант теории применялся для описания разрушения квазихрупких материалов [32-35]. Представляет интерес рассмотреть с позиций этой теории классическую задачу плавления твердых тел. Не прибегая к обзору литературы по этому вопросу, остановимся только кратко на изложении его с позиций мезоскопической неравновесной термодинамики.

Первый важный момент при таком рассмотрении – выбор пары термодинамических переменных ответственных за процесс плавления. В классической неравновесной термодинамике роль такой пары играет параметр порядка – относительное изменение объема жидкой и твердотельной фазы. При этом для твердотельного состояния параметр порядка как для более симметричной фазы равен единице, а для жидкого состояния нулю. Такой порядок обусловлен как раз тем, что за основу термодинамического рассмотрения было взято чисто формальный признак фазы – ее симметрия. В то же время ясно, что симметрия не является базовым фундаментальным параметром физической системы, а является лишь прямым следствием минимизации энергии. Поэтому ее изменение, выбранное из соображений симметрии, оказалось противоположным реальному изменению энергии системы – параметр порядка растет, когда энергия системы уменьшается. По этой причине более удобным было бы ввести, скорее, параметр бес-

порядка, который бы возрастал при переходе от твердотельного к жидкому состоянию. Кстати, в классической термодинамике энтропия именно такой смысл и имеет.

В качестве меры беспорядка можно рассмотреть избыточный свободный объем, который применяется для описания аморфных твердых тел. Аргументом в пользу такого определения можно привести тот факт, что аморфное состояние это, по сути, замороженное жидкое состояние. Поэтому избыточный объем является некоторой общей характеристикой, как жидкого, так и аморфного состояния, как мера отклонения их обеих от твердотельного кристаллического состояния. При этом для жидкого состояния эта мера будет выше.

Основываясь на этом, запишем внутреннюю энергию в виде:

$$u = u_0^* + \frac{1}{2}\lambda\left(\varepsilon_{ii}^e\right)^2 + \mu\left(\varepsilon_{ij}^e\right)^2 + \alpha s^2 + \beta s\varepsilon_{ii}^e - \gamma s\left(\frac{1}{2}\tilde{\tilde{\lambda}}\left(\varepsilon_{ii}^e\right)^2 + \tilde{\tilde{\mu}}\left(\varepsilon_{ij}^e\right)^2\right) + \frac{c}{2}(\nabla h)^2 + \varphi_0 h - \frac{1}{2}\varphi_1 h^2 + \frac{1}{3}\varphi_2 h^3 - \frac{1}{4}\varphi_3 h^4, \tag{7}$$

где смысл постоянных теории в свете сказанного выше очевиден и не требует специальной расшифровки. Здесь для простоты полагается, что от температуры существенно зависит только коэффициент $\varphi_0 = \varphi_0^* + qT$. Этот коэффициент, стоящий при линейном по h слагаемом, характеризует степень неравновесности процесса. При медленном нагревании процесс протекает квазиравновесно и, казалось, эта константа должна быть равна нулю, в то же время, необратимые неравновесные процессы также имеют место, в результате которых и будет образовываться избыточный свободный объем и дополнительное производство энтропии (и теплоты) от внутренних источников.

В этой постановке пластическая деформация отсутствует, а упругая ее часть, фактически, является полной деформацией. В рассматриваемом процессе нагревания упругая деформация не участвует, но она оставлена как виртуальная величина, чтобы можно было изучить изменение упругого сдвигового модуля μ, который, как известно, в жидком состоянии обращается в нуль, и может служить одним из признаков фазового состояния. Необратимая внешняя работа не совершается, а изменение внутренней энергии осуществляется за счет медленного (равновесного) внешнего подогрева. По этой причине неравновесная энтропия s' пренебрежимо мала, а равновесная энтропия изменяется по закону:

$$s = s_0 + at. \tag{8}$$

Равновесная температура соответственно меняется согласовано по закону:

$$T = \frac{\partial u}{\partial s} = 2\alpha s + \beta\varepsilon_{ii}^e - \gamma\left(\frac{1}{2}\tilde{\tilde{\lambda}}\left(\varepsilon_{ii}^e\right)^2 + \tilde{\tilde{\mu}}\left(\varepsilon_{ij}^e\right)^2\right) = T_0 + bt. \tag{9}$$

Качественно вид кривых внутренней или свободной энергии будет такой же, как изображено на рис. 1, однако, кривые будут параметризированы не по тензору деформаций, а по температуре. С ростом температуры состояние системы будет изменяться, переходя от одной параметризованной кривой к другой, оставаясь вблизи левого максимума. При этом небольшое возрастание избыточного объема, которое имеет место на этой стадии, можно связать с тепловым расширением материала при нагревании. Это процесс продолжается до тех пор, пока при некоторой критической температуре он не выйдет на кривую, у которой отсутствует потенциальный барьер между максимами. После этого система резко по сценарию фазового перехода 1-го рода переходит на второй (правый) максимум, соответствующий жидкому состоянию. При охлаждении состояния системы будут изменяться, также переходя от одной параметризованной кривой к другой, оставаясь теперь вблизи правого максимума, до тех пор, пока не выйдут на кривую, у которой отсутствует потенциальный барьер между максимами. Эта кривая лежит ниже той кривой, для которой отсутствовал барьер между максимами при нагревании, поэтому точка замерзания по температуре будет лежать ниже точки кипения (гистерезис). Как видим, в рамках модели можно объяснить все качественные особенности процесса плавления и затвердевания твердых тел.

Приведенная здесь модель может быть применена для разработки новой модели смазки, и объяснения наблюдаемого там явления stick-slip. В работе [36] описана модель смазки, в основу которой заложены представления о локальном плавлении и затвердевании материала в процессе проскальзывания. В ней используется классический вариант определения параметра порядка и постулируется правомерность моделирования процесса плавления и затвердевания материала смазки в рамках теории фазовых переходов второго рода. Однако частный вид свободной энергии в форме ряда по четным степеням параметра порядка, фактически, ничем не обосновывается. В то же время, отсутствие согласованной симметрии жидкой и твердой фазы указывает на то, что нечетные степени должны также учитываться, тем более, что присутствие линейных слагаемых по параметру порядка должно быть обусловлено ярко выраженным неравновесным характером процесса проскальзывания.

Внутренняя энергия для модели, в которой одновременно учтены, как вклады от больших сдвиговых деформаций, так и по температуре, будет иметь вид:

$$u = u_0^* + \frac{1}{2}\lambda\left(\varepsilon_{ii}^e\right)^2 + \mu\left(\varepsilon_{ij}^e\right)^2 + X_0^{(0)}s' - X_1^{(0)}(s')^2 + \alpha s^2 + \beta s\varepsilon_{ii}^e$$
$$+ s'\left(-X_3^{(0)}\varepsilon_{ii}^e + X_5^{(0)}\left(\varepsilon_{ii}^e\right)^2 + X_6^{(0)}\left(\varepsilon_{ij}^e\right)^2\right) + (s')^2 X_4^{(0)}\varepsilon_{ii}^e \qquad (10)$$
$$+ \frac{c}{2}(\nabla h)^2 + \varphi_0 h - \frac{1}{2}\varphi_1 h^2 + \frac{1}{3}\varphi_2 h^3 - \frac{1}{4}\varphi_3 h^4,$$

где u_0^*, λ, μ, $X_0^{(0)}$, $X_1^{(0)}$, α, β, $X_3^{(0)}$, $X_5^{(0)}$, $X_6^{(0)}$, $X_4^{(0)}$, c, φ_0, φ_1, φ_2, φ_3 – константы разложения. Причем в свою очередь:

$$\varphi_0 = \varphi_0^* + g\varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2}\overline{\lambda}\left(\varepsilon_{ii}^e\right)^2 + \overline{\mu}\left(\varepsilon_{ij}^e\right)^2 + X_0 s' - X_3 s'\varepsilon_{ii}^e,$$
$$\varphi_1 = \varphi_1^* - 2e\varepsilon_{ii}^e \pm Y_0 s', \qquad (11)$$
$$\varphi_2 = \varphi_2^*.$$

Эволюционное уравнения для энтропии в явном виде тогда будет:

$$\frac{\partial s'}{\partial t} = +\gamma_{s'}\left(X_0^{(0)} - X_3^{(0)}\varepsilon_{ii}^e + X_5^{(0)}\left(\varepsilon_{ii}^e\right)^2 + X_6^{(0)}\left(\varepsilon_{ij}^e\right)^2 - 2s'X_1^{(0)}\right) -$$
$$- \gamma_{s'}\left(X_0 - X_3\varepsilon_{ii}^e - 2s'X_1\right)h + \frac{1}{2}\gamma_{s'}Y_0 h^2 \qquad (12)$$

Изменение во времени равновесной энтропии температуры:

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \gamma_{s'}\left(X_3^{(0)}\varepsilon_{ii}^e + 2s'X_1^{(0)}\right) + \gamma_{s'}X_0 h - L\Delta s$$
$$T = \alpha s + \beta\varepsilon_{ii}^e \qquad (13)$$

Эволюция избыточного свободного объема может быть описана уравнением:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \gamma_h\left(\Delta h + \varphi_0 - \overline{\varphi} - \varphi_1 h + \varphi_2 h^2 - \varphi_3 h^2\right) \qquad (14)$$

Упругое напряжение и закон упрочнения примем в виде:

$$\sigma_{ij} = \lambda\delta_{ij}\varepsilon_{ii}^e + 2\mu\varepsilon_{ij}^e + \left(g\delta_{ij} + \overline{\lambda}\delta_{ij}\varepsilon_{ii}^e + 2\overline{\mu}\varepsilon_{ij}^e\right)h + \frac{1}{2}e\delta_{ij}h^2 - X_3\delta_{ij}hs'$$
$$\varepsilon^e = \varepsilon_0^e + \frac{B}{T}\tanh\left(a\varepsilon^p\right) \qquad (15)$$

Здесь учтено, что с ростом температуры упрочнение материала будет уменьшаться. Качественно явление stick-slip можно объяснить из схемы приведенной на рис. 5.

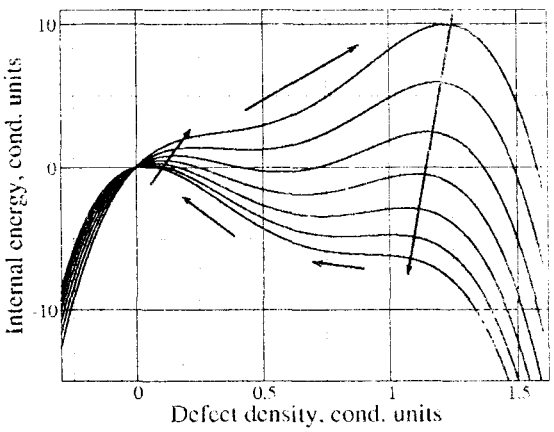


Рис. 5 Схема явления stick-slip

На начальной стадии нагревания от внутренних источников за счет необратимой части работы система переходит с одной параметрической кривой на другую так, как это указано стрелочкой слева. Переходы эти осуществляются вблизи равновесных состояний системы (вблизи максимумов внутренней энергии). Если на этой стадии начать материал охлаждать, то эволюция системы пройдет те же состояния в обратном направлении (при этом процесс в целом остается необратимым, поскольку произведены изменения во внешних телах – теплота от нагревателя передалась холодильнику). При достижении критической температуры, когда система достигнет кривой, у которой отсутствует потенциальный барьер между максимами внутренней энергии система резко и необратимо перейдет в жидкое состояние (slip), описываемым правым максимумом внутренней энергии. Систему в этот момент остановить уже не возможно. Если в этот момент прекратить нагревание системы, то она все равно перейдет в конечное состояние. В новом состоянии система резко уменьшает выделение теплоты за счет необратимых внутренних процессов (идеальная смазка) и начинает охлаждаться вследствие теплоотдачи окружающим телам. Состояния системы эволюционируют теперь вдоль максимумов так, как указано на рис. 5 большой стрелкой, и, достигнув кривой, у которой отсутствует потенциальный барьер, система резко переходит в твердотельное состояние (stick). Процесс, по сути, имеет автоволновой характер и периодически повторяется во времени.

Еще один важный мезоскопический эффект – гистерезисные явления и стабилизацию фаз в процессе обработки давлением сплавов типа Fe-Mg. Суть его заключается в том, что при увеличении давления и при его дальнейшем уменьшении материал обнаруживает свойство гистерезиса. Особенностью его является зависимость ширины гистерезиса от величины среднего размера зерна – с уменьшение размера зерна ширина гистерезиса увеличивается. Наконец, для размера зерна порядка 100нм ширина гистерезиса увеличивается настолько, что нисходящая ветвь уходит в область отрицательных давлений. Поскольку последние не могут реализоваться без специальных условий, то ε-фаза остается стабильной при нормальных атмосферных давлениях. Это явление можно объяснить в рамках той же идеологии, что была описана выше. Внутреннюю энергию для металлической системы с некоторым размером, которому сопоставляется дефектность h, и процентным содержанием ε-фазы C, можно записать в виде:

$$u = u_0\left(\varepsilon_{ii}^e, h\right) + \varphi_0 C - \frac{1}{2}\varphi_1 C^2 + \frac{1}{3}\varphi_2 C^3 - \frac{1}{4}\varphi_3 C^4 \qquad (16)$$

где

$$u_0 = u_0^* + \frac{1}{2}\lambda\left(\varepsilon_{ii}^e\right)^2 \qquad (17)$$

$$\varphi_0 = \varphi_0^* - g\varepsilon_{ii}^e - qh \qquad (18)$$

$$\varphi_1 = \varphi_1^* + 2e\varepsilon_{ij}^e - Qh \qquad (19)$$

Здесь выделена зависимость от гидростатического давления, представленного ε_{ii}^e, и дефектности материала h (размер зерен $d \approx 1/h$), как от управляющих параметров. Графики концентрации ε-фазы в цикле роста и последующего снижения гидростатического давления до нулевого значения обнаруживают гистерезис (рис. 6). При этом более мелкому зерну (большим h) соответствует более широкий гистерезис. Можно утверждать, что, если взять достаточно мелкое зерно, то кривая гистерезиса на участке снижения давления выйдет за пределы положительных значений давления (отрицательных значений тензора деформаций ε_{ii}^e), и, следовательно, ε-фаза в этом случае будет устойчивой при нулевых значениях давления.

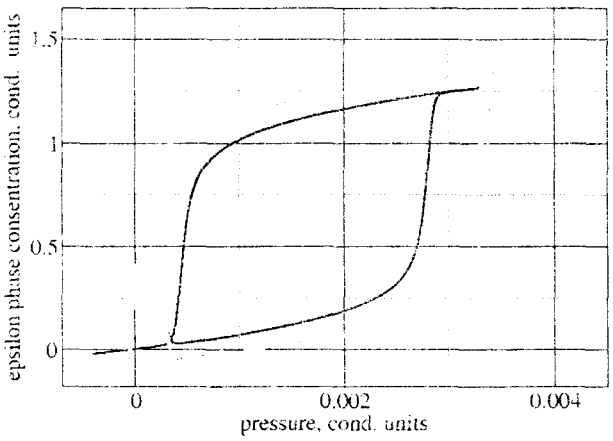


Рис. 6 Гистерезисные кривые концентрации ε-фазы

Графики на рис. 6 построены для значений параметров $u_0 = 0$; $\lambda = 20.8GPa$; $\varphi_0^* = 0.0002$; $g = 7.0$, $q = 0.008$; $\varphi_1^* = 1.12 \cdot 10^{-12}$; $e = 3.6 \cdot 10^{-12}$; $Q = 1.12 \cdot 10^{-13}$, $\varphi_2 = 0.0225 * 10^{-21}$ и $\varphi_2 = 0.0225 * 10^{-21}$. Для внутренней кривой $h = 0$, для внешней кривой $h = 1$. Графики даны в относительных единицах и иллюстрируют принципиальную возможность построения гистерезисных кривых в рамках рассматриваемого подхода.

РЕЗЮМЕ

Врахування зміцнення матеріалу та неоднорідності процесу ІПД дозволило більш наближено до практики описати формування дефектної (зеренної) структури. Показано, що при зміцнені матеріалу система еволюціонує спочатку перетинаючи систему параметризованних кривих внутрішньої чи вільної енергії, а потім «сідає» на одну з них, й далі сценарій відбувається за класичною схемою фазових переходів. Показано, що матеріали, які менш здатні зміцнюватись, більш важко піддаються фрагментації зеренной структури. Еволюція дефектної структури матеріалу в області лівого максимуму термодинамічного потенціалу протіка з значно меншою швидкістю, в той час як перехід між лівим та правим максимумом протіка досить швидко. Це виправдовує використання саме терміну «інтенсивних пластичних деформацій», а не спрощено – великих деформацій. Врахування кінцевого часу дії деформацій в активній зоні установки ІПД дозволило описати багатоциклічний процесс обробки матеріалів. Виникаюча при цьому неоднорідність зменшує рівень дефектності, який формується в процесі ІПД, тобто менш сприяє формуванню структри металу з меншим розміром зерна.

SUMMARY

Taking in account the material strengthening and heterogeneity of SPD permits to describe the formation of defect (grain) structure closer to practice. It is shown the system is evaluated with material strengthening, at the first stage, crossing the set of parameterize curves of internal or free energy and next it sits down on the one of they, and further the scenario passes with classic scheme of phase transitions. It is shown the material, which has less capacity for strengthening, is harder for grain structure fragmentation. Evolution of defect structure of material in the region of the left maximum of thermodynamic potential goes with essentially lesser temp, as in the same time the transition from left to right maximum runs even quickly. It justifies the use just term the «intense plastic deformation», but no simply – the large deformation. Taking in account the finite time of deformation action in the active zone of SPD equipment permits to describe a multicyclic process of material treatment. Heterogeneity arising from it decreases defect value, which is formatted during SPD, that is, it assists less of formation of metal structure with smaller size of grain.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Малыгин Г.А. ФТТ – **43**: – № 10: 1832 (2001).
2. Малыгин Г.А. ФТТ – **44**: – № 7: 1249 (2002).
3. Малыгин Г.А. ФТТ – **44**: – № 11: 1979 (2002).
4. Малыгин Г.А. УФН – **169**: – в. 9: 979 (1999).
5. Копылов В.И., Чувильдеев В.Н. Металлы. – № 1: 22 (2004).
6. Чувильдеев В.Н. Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и эксперимент, – М.: Физматлит, 2004.
7. Чувильдеев В.Н., Копылов В.И., Нохрин А.В., Макаров И.М., Лопатин Ю.Г. Доклады РАН. – 396: – № 3: 332 (204).
8. Kopylov V.I., Chuvil'deev V.N., in *Severe Plastic Deformation*, edited by A. Burhanettin (Nova Science Publishers, New York, 2006), p. 37.
9. Хоник В.А. О роли свободного объема в формировании закономерностей структурной релаксации и пластической деформации металлических стекол. Тезисы IV Международной школы-конференции «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений», с. 33, Тамбов (2007).
10. Бобров О.П., Лаптев С.Н., Нейхойзер Х., Хоник В.А., Чах К. ФТТ – **46**. – № 10: 1801 (2004).
11. Глезер А.М. Механические свойства аморфных сплавов. Приглашенный доклад на IV Международной школе-конференции "Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений", Тамбов (2007).
12. Beygelzimer Ja.E. Mech. mater. – **37**: 753 (2005).
13. Бейгельзимер Я.Е., Варюхин В.Н., Орлов Д.В., Сынков С.Г. Винтовая экструзия – процесс накопления деформаций. – Донецк: ТЕАН 2003.
14. Метлов Л.С. МФиНТ – **29**: – № 3: 335 (2007).
15. Метлов Л.С. Деформация и разрушение материалов – № 2: 40 (2007).
16. Метлов Л.С. Вістник Донецького університету, сер. А, Природничі науки, в. 1, 296 (2006).
17. Метлов Л.С. Вістник Донецького університету, сер. А, Природничі науки, в. 2, 196 (2006).
18. Метлов Л.С. Вістник Донецького університету, сер. А, Природничі науки, в. 1, 196 (2007).
19. Метлов Л.С., Материалы IV Международной школы-конференции «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений», Тамбов, с. 225 (2007).
20. Rubi J.M., Gadomski A. Physica A, **326**: 333 (2003).

21. Santamaria-Holek I., Rubi J.M., A. Perez-Madrid. ArXiv: cond-mat /0409362, 2004: http://arxiv.org/abs/cond-mat/0409362.
22. Инденбом В. Л., Орлов Л. Ж. УФН – **76**: – в. 3: 557 (1962).
23. Малышева С.П., Галлеев Р.М., Жеребцов С.В., Салищев Г.А. ФТВД - **12**: – № 4: 66 (2002).
24. Волчок О.И., Калиновский В.В., Мац А.В., Неклюдов И.М., Оковит В.С., Соколенко В.И., Хаймович П.А., Черняк Н.А., Чиркина Л.А. Тезисы международной конференции «Мезоскопические явления в твердых телах», Донецк, с. 83 (2007).
25. Сегал В.М., Резников В.И., Копылов В.И. Процессы пластического структурообразования металлов – Минск: Новые технологии, 1994. 232 с.
26. Segal V., in Severe Plastic Deformation, edited by A. Burhanettin – New York: Nova Science Publishers. 2006, p. 1.
27. Firstov S., Brodnikovsky M., Danylenko M., Podrezov Yu. Rev. Adv. Mater. Sci., **4**, 155 (2003).
28. Валиев Р.З., Александров И.В. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией. – М.: Логос, 2000.
29. Valiev R.Z., Islamgaliev R.K. Alexandrov I.V. Progress in materials science. – **45**: 103 (2000).
30. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. - М.: Наука, 1982.
31. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика Часть 1. М.: Наука, 1976.
32. Метлов Л.С., Морозов А.Ф. ФТВД– 7: – № 3: 58 (1997).
33. Метлов Л.С., Морозов А.Ф. ФТВД– **11**: - № 2: 93 (2001).
34. Metlov L.S. ArXiv: cond-mat /0204361, 2002: http://arxiv.org/abs/cond-mat/0204361
35. Метлов Л.С. ФТВД - **17**: – № 3: 71 (2007).

Надійшла до редакції 24.09.2007 р.

УДК538.11

МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРА СПИНОВЫХ ВОЛН МАГНИТНОЙ НАНОПРОВОЛОКИ

А.Н.Кучко, В.В.Кругляк, Н.А.Дворник*
* School of Physics, University of Exeter, Stocker Road, Exeter, EX4 4QL, UK

1. Введение

Исследования в области спиновых волн (СВ) активно проводятся в последнее время, в связи с перспективностью их применения в технике террагерцового диапазона, который на данный момент является недостижимым для классических электронных устройств. В следствии этого существует ряд работ изучающих процессы возбуждения, распространения и детектирования СВ [1,2,3,4]. Практически рассмотрение этих процессов сводится к отысканию способов построить аналитическое решение уравнения Ландау-Липшица(в рамках предлагаемых приближений), что привело к возникновению различного рода компьютерных пакетов (например Ansys, OOMMF и др.) осуществляющих разрешение этого уравнения на основе численных методов с целью изучения указанных выше процессов в различного рода структурах.

Одним из наиболее развитых пакетов является Object Oriented Micromagnetic Framework (OOMMF) [5]. Он обладает достаточной гибкостью, что позволяет с его помощью изучать СВ в структурах любой конфигурации. Пакет содержит в себе ряд модулей: визуализирующих, решающих, ввода-вывода. Фактически он осуществляет численное решение уравнения Ландау-Липшица имеющего в самом общем случае вид:

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = g(\vec{M}_0 \times \left[\vec{h} + \alpha_{ik} \frac{\partial^2 \vec{m}}{\partial x_i \partial x_k} + \beta \vec{n}(\vec{m}\vec{n}) - \frac{1}{M_0^2}(\vec{M}_0 \vec{H}_0^{(i)} + \beta(\vec{M}_0 \vec{n})^2 \vec{m}) \right]), \qquad (1)$$

где g – гиромагнитное отношение, $\vec{M}_0$ – намагниченность насыщения, α_{ik} – тензор постоянных обменного взаимодействия, β – константа анизотропии, $\vec{n}$ – вектор задающий направление анизотропии, $\vec{H}_0^{(i)}$ – постоянное внутреннее поле магнетика, $\vec{h}$ – малое отклонение от $\vec{H}_0^{(i)}$ и $\vec{m}$ – от $\vec{M}_0$.

Для этой цели используется ряд методов, выбор которых зависит от каждой конкретной ситуации в частности. Результатом его работы является массив данных, представляющий собой распределение намагниченности (или любого другого магнитного параметра в рамках модели OOMMF) в структуре в совокупности отсчетов времени симуляции (или один массив в отсутствии динамики). Пакет использует декартову систему координат. Так как в закон дисперсии можно трактовать как передаточную функцию устройства на основе СВ, то его знание, в этой области исследований, является их основной целью. Предлагается реализация метода получения спектра на основе данных предоставляемых OOMMF.

2. Метод

Пусть в результате моделирования мы получили распределение намагниченности в виде (здесь и в дальнейшем предполагается, что рассматривается случай колебаний намагниченности вдоль одной из координатных осей – квазиодномерный случай, для определенности будем полагать это осью Z):

$$m(z,t) = m(i\Delta z, j\Delta t)$$

где Δz и Δt – величины разбиения по координате и времени соответственно, а i и j – номер шага. Подействовав на него двумерным быстрым дискретным преобразованием Фурье [6], мы так же получим значения намагниченности, но уже в зависимости от волнового вектора $\vec{k}$ (в нашем случае только от компоненты k_z) и циклической частоты ω , а именно

$$m(p,q) = \frac{1}{\sqrt{Z}\sqrt{T}} \sum_{i,j=0}^{Z,T} m(i,j) e^{\frac{2\pi i p}{Z}} e^{\frac{2\pi j q}{T}}$$

где Z и T – количество шагов по времени и координате, а p и q – следуют из равенства

$$m(k_z, \omega) = m(p\Delta k_z, q\Delta\omega)$$

$$\Delta k_z = \frac{1}{Z\Delta z}$$

© Кучко А.Н., Кругляк В.В., Дворник Н.А.

$$\Delta\omega = \frac{1}{T\Delta t}$$

3. Спектр СВ однородной нанопроволоки

Во всех случаях моделирования была использована премаллоевая нанопроволока с размерными параметрами 4100x20x20nm, структура показана на рис.1. Данный объект очень актуален в области СВ техники, так как является соединительным элементом элементарных СВ устройств (как цифровых так и аналоговых) и необходимо изучение влияния его физических параметров на процесс передачи по нему СВ сигналов. Он является вполне реальным и активно используется в разработках компаний IBM и Hitachi.

Область возбуждения имеет размеры 1x20x20nm. Это соответствует размеру разбиения по координате (размер ячейки выбран 1x20x20nm) нанопороволоки с целью уменьшения интерференционных эффектов и соответственно влияния данной области на результаты моделирования. Материал обладает анизотропией типа «легкая ось» направленной вдоль оси x и в начале предполагается однородное намагничение вдоль нее же. Теоретический спектр, был получен исходя из известного выражения [7]:

$$\omega(k_z) = gM_0(\alpha(2\pi k_z)^2 + \beta) \qquad (2)$$

$$\alpha = \frac{2A}{4\pi M_0^2}$$

$$\beta = \frac{2K}{4\pi M_0^2}$$

где M_0 – намагниченность насыщения, A – постоянная обменного взаимодействия, K – константа анизотропии.

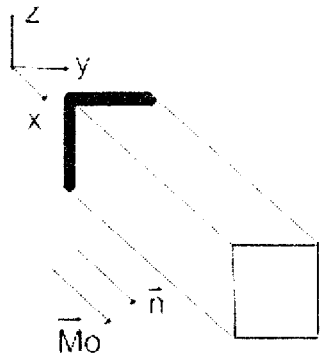


Рис.1. Профиль нанопроволоки, черным обозначена область в которой происходит возбуждение СВ

На рис. 2 изображен спектр СВ в нанопроволоке шаг по времени выбран $\Delta t = 0.125 \cdot 10^{-11} c$, что по георему Котельникова [8] устанавливает верхнюю границу спектра по частоте $\omega_{max} / 2\pi = 4 \cdot 10^{12}$ Гц, аналогично для волнового вектора получается $k = 5 \cdot 10^8 \frac{1}{m}$, параметры материала указаны в подписях к соответствующим рисункам. Возбуждение осуществляется единичным прямоугольным импульсом амплитудой 1 Oe и длительностью $\Delta t = 0.125 \cdot 10^{-11} c$, в рамках модели OOMMF это практически соответствует возбуждению δ – импульсом, что приводит к возникновению волнового пакета СВ, тем самым дисперсия происходит практически для всего диапазона частот (ограниченным только ω_{max}). В определенной области значений волнового вектора, теоретический спектр совпадает с моделированным. Это обусловлено тем, что выражение (2) получено в континуальном приближении, однако оно применимо в области малых k, что хорошо видно из рисунка. Общее время моделирования $t = 10^{-7} c$. Следует заметить что выбор параметров разбиения не случаен, а обусловлен применением быстрого дискретного преобразования Фурье(БДПФ) обладающего известными недостат-

ками [6]. Они заключаются в том, что при использовании БДПФ гармоники, лежащие за критической частотой ω_{max} все равно отображаются на область частот ограниченных ω_{max}. Вследствие этого требуется выбор таких шагов разбиения по времени и координате, при использовании которых весь спектр лежал бы в пределах критической частоты.

Далее были изменены параметры проволоки и так же для них был промоделирован спектр СВ. В данном случае использован шаг по времени $\Delta t = 0.125 \cdot 10^{-12} c$, что соответствует $\omega_{max} / 2\pi = 4 \cdot 10^{13}$ Гц. Разбиение по координате оставлено прежним. Как видно теоретический спектр совпадает с моделируемым уже в гораздо большей области значений волнового вектора, это обусловлено тем, что критическое значение волнового вектора ограничивающего применимость континуального приближения, лежит за пределами графика.

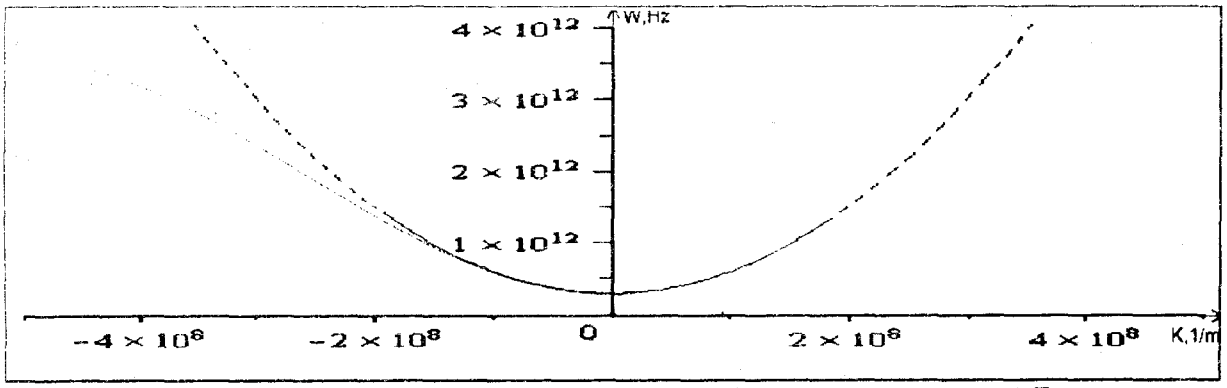


Рис.2 Спектр СВ в нанопроволоки, штрихованая-теоретический, сплошная-моделируемый. Параметры нанопроволоки: обменная постоянная $A=13\times10^{-12}$ Дж/м, константа анизотропии $K=500\times10^{4}$ Дж/м^3, намагниченность насыщения $M_0=1000\times10^{3}$ А/м

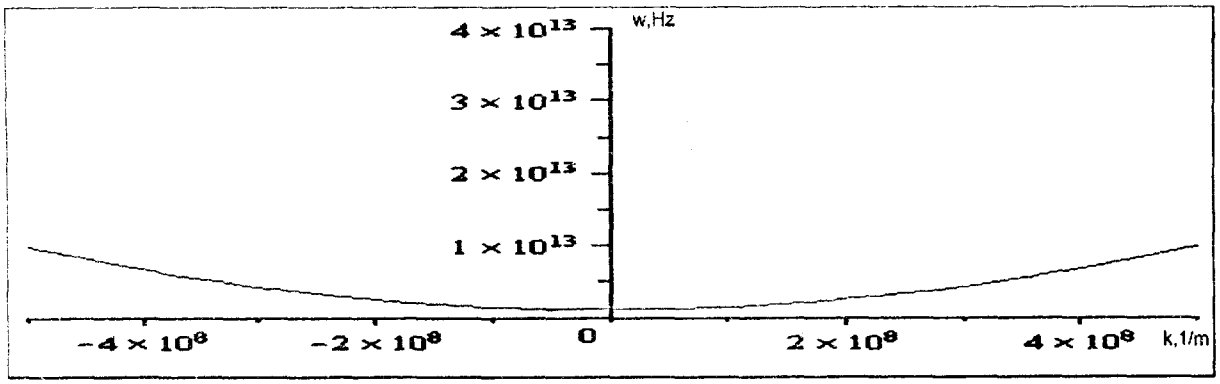


Рис.3 Спектр СВ в нанопроволоки, штрихованая-теоретический, сплошная-моделируемый. Параметры нанопроволоки: обменная постоянная $A=13\times10^{-12}$ Дж/м, константа анизотропии $K=1600\times10^{4}$ Дж/м^3, намагниченность насыщения $M_0=860\times10^{3}$ А/м

4. Заключение

Был реализован метод получения спектра СВ (тем самым расширены функциональные возможности пакета OOMMF) и проведена его проверка на примере однородной нанопроволоки. Показано, что в областях применимости континуального приближения он соответствует теоретически полученному, путем точного решения уравнения Ландау-Лишица. Это в свою очередь подтверждает пригодность OOMMF для подобного рода класса задач, а так же метода получения спектра в целом, тем самым давая возможность применять его для изучения гораздо более сложных (и более реальных) структур в дальнейшем.

РЕЗЮМЕ

Реалізовано метод одержання спектра спінових хвиль на основі даних, що надаються пакетом OOMMF. Проведено процес моделювання спектра спінових хвиль магнітної нанопроволоки для різних значень її фізичних параметрів. На основі порівняння теоретичного й модельованого спектрів, підтверджена актуальність застосування даного пакета в подібного роду завданнях.

SUMMARY

The method of reception of a spectrum of spin waves on the basis of given is realized by package OOMMF. Process of modeling of a spectrum of spin waves magnetic nano a wire for various values of its physical parameters is lead. On the basis of comparison of theoretical and modeled spectra, the urgency of application of the given package in similar sorts problems is confirmed.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Strong Radiation of SpinWaves by Core Reversal of a Magnetic Vortex and Their Wave Behaviors in Magnetic Nanowire-Waveguides, Sangkook Choi, Ki-Suk Lee, Konstantin Yu. Guslienko, and Sang-Koog Kim in PRL **98**, 087205 (2007).
2. Vortex-antivortex assisted magnetization dynamics in a semi-continuous thin-film model system studied by micromagnetic simulations, Sang-Koog Kim,a! Ki-Suk Lee. and Byoung-Woo Kang, Kyung-Jin Lee, J. B. Kortright in APL **86**, 052504 (2005).
3. Radiation of spin waves from magnetic vortex cores by their dynamic motion and annihilation processes, Ki-Suk Lee, SangKook Choi, and Sang-Koog Kim in APL **87**, 192502 (2005).
4. Spin-wave interference, Sangkook Choi, Ki-Suk Lee, and Sang-Koog Kim in APL **89**, 062501 (2006).
5. OOMMF code developed by M. J. Donahue and D. G. Porter see http://math.nist.gov/oommf .
6. Numerical Recipes in C, William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling and Brian P. Flannery, CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS 2002.
7. Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., Пелетминский С.В. Спиновые волны. – М.: Наука, 1967.
8. Кузьмин И.В., Кедрус В.А. Основы информации и кодирования. – Киев: Вища школа, 1977.

Надійшла до редакції 19.11.2007 р.

УДК538.11

СПЕКТР СПИНОВЫХ ВОЛН МАГНОННОГО КРИСТАЛЛА С КОНЕЧНОЙ ТОЛЩИНОЙ ПЕРЕХОДНЫХ ГРАНИЦ И МАЛОЙ МОДУЛЯЦИЕЙ АНИЗОТРОПИИ

А.Н.Кучко, В.С.Ткаченко

Введение

В последнее время все более широкий интерес исследователей привлекают искусственно созданные мультислойные структуры с периодической модуляцией какого-либо материального параметра [1]. Спектры волн в таких структурах имеют зонное строение, как и в кристаллах, поэтому такие материалы называют плазмонными, фотонными, фононными и т.д. кристаллами в зависимости от изменяющейся характеристики материала и типа распространяющихся в них волн [2, 3]. В данной работе исследуются магнонные кристаллы (МК) – мультислойные структуры с периодически меняющимися магнитными параметрами. Интерес к их изучению вызван возможностью использования распространяющихся в них спиновых волн (СВ) как носителей информации [4, 5], а наличие в спектре СВ запрещенных зон позволяет эффективно управлять распространением СВ.

Процессы распространения СВ в идеализированной модели МК с бесконечно тонкими межслойными границами изучены достаточно хорошо [6-10]. Все больший интерес вызывают модели, более реалистично описывающие МК, например модели, учитывающие наличие дефектов [1, 12], неоднородности периода структуры [11], влияние периодических неоднородностей в распределении параметра магнитной вязкости на характер распространения и затухания СВ [12].

В этой связи, представляются интересными явления, обусловленные конечностью толщин переходных границ. Такая «неидеальность» границ может быть обусловлена, в частности, технологией приготовления МК. В [7, 13, 10, 14] были рассмотрены СВ в МК с размытыми межслойными границами в отсутствие затухания. При этом было обнаружено, что спектр СВ существенно зависит от толщины межслойных границ [15, 16, 17].

Модель материала

Рассмотрим МК, представляющий собой систему чередующихся однородных магнитных, характеризующихся различными величинами константы одноосной анизотропии β_- и β_+ в каждом слое, магнитную вязкость не учитываем. Будем предполагать, что «основные» слои разделены «переходными» слоями конечной толщины. Выберем в качестве оси z направление, перпендикулярное к плоскости слоев.

Координатная зависимость анизотропии для такого МК может быть представлена в виде соотношения

$$\beta(z) = \beta[1 + \gamma\rho(z)], \qquad (1)$$

где $\beta = \frac{\beta_- + \beta_+}{2}$, $\gamma = \frac{\beta_+ - \beta_-}{\beta_- + \beta_+}$. Координатная зависимость анизотропии (Рис.1) сведется к виду

$$\rho_i(z) = \begin{cases} -1 & z_0 + nL < z < z_1 + nL \\ -1 + f_i(z) & z_1 + nL < z < z_2 + nL \\ 1 & z_2 + nL < z < z_3 + nL \\ 1 - f_i(z) & z_3 + nL < z < z_4 + nL \end{cases}, \text{ где } i = a, b, c,$$

Выбор индекса зависит от рассматриваемой модели: *a* соответствует линейной модуляции, *b* – синусоидальной, *c* – модели, описываемой эллиптическим синусом.

$$f_a(z) = \frac{2(z - z_j)}{\delta}, \quad f_b(z) = \sin\left(\frac{\pi(z - z_j)}{\delta}\right), \quad f_c(z) = \text{sn}\left(\frac{K(m)(z - z_j)}{\delta}, m\right),$$

где $K(m)$ –эллиптический интеграл [10], m – модуль, $j = 2,4$ в зависимости от номера слоя.

© Кучко А.Н., Ткаченко В.С.

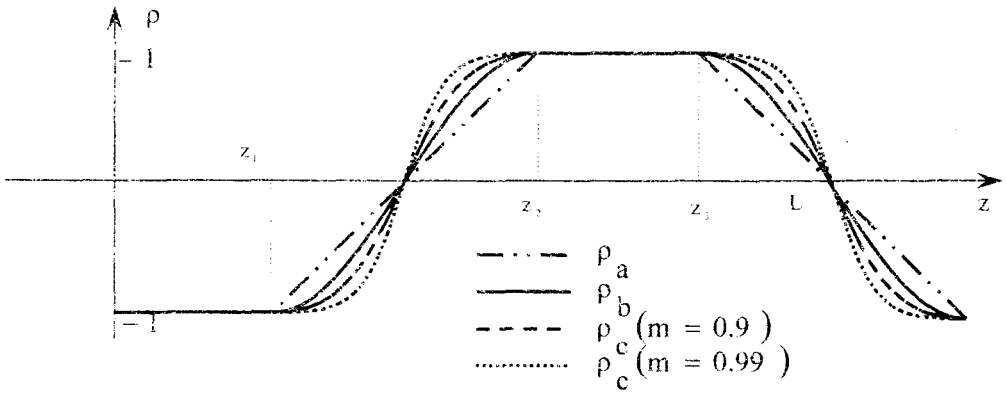


Рис 1. Координатная зависимость распределения анизотропии для приближенного метода

Уравнение движения

Для описания динамики магнитного момента воспользуемся уравнением Ландау-Лифшица [18]

$$\dot{\mathbf{M}} = -g\left[\mathbf{M}\times\left(-\frac{\partial E_m}{\partial \mathbf{M}}+\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\frac{\partial E_m}{\partial(\partial \mathbf{M}/\partial \mathbf{x})}\right)\right], \tag{7}$$

где

$$E_m = \frac{1}{2}\alpha\left(\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \mathbf{x}}\right)^2 - \frac{1}{2}\beta(z)\cdot(\mathbf{Mb})^2 - \mathbf{MH}, \tag{8}$$

Здесь **M** – намагниченность, **H** – напряженность магнитного поля, g – гиромагнитное отношение, α - обменный параметр, **b** – направление оси магнитной анизотропии, перпендикулярное оси z. Внешнее магнитное поле **H** и постоянная часть намагниченности $\mathbf{M}_0$ также направлены вдоль этой оси. Представим намагниченность в форме

$$\mathbf{M}(\mathbf{x},t) = \mathbf{M}_0 + \mathbf{m}(\mathbf{x},t), \tag{9}$$

Проведем линеаризацию уравнения (7) при условии $|\mathbf{m}| << |\mathbf{M}_0|$. Взяв $\mathbf{m} \sim \exp(i\omega t)$, получаем следующее уравнение для $\mu = m_x + im_y$:

Введены обозначения

$$\Delta\mu + [\nu - \varepsilon\rho(z)]\mu = 0. \tag{10}$$

$$\nu = (\omega - \omega_0)/\alpha g M,\ \varepsilon = \gamma\beta/\alpha,\ \omega_0 = g(H + \beta M). \tag{11}$$

Спектр СВ

Точное решение уравнения (10) можно получить лишь для ограниченного числа профилей $\rho(z)$ [17, 19]. В остальных случаях представляется целесообразным воспользоваться приближенным методом, суть которого заключается в следующем.

Будем, по теореме Флоке-Блоха, искать решение в виде

$$\mu(x) = e^{ikr}\sum_{p=-\infty}^{\infty}\mu_p e^{ipqz}, \tag{12}$$

где $|q| = 2\pi/L$, **k** – волновой вектор [20]. Представим функцию $\rho(z)$ в форме комплексного ряда Фурье:

$$\rho(z) = \sum_{p=-\infty}^{\infty}\rho_p e^{ipqz}. \tag{13}$$

Подставляя выражения (12) и (13) в уравнение (10), получим уравнение для μ_p:

$$\left[v - k_x^2 + k_y^2 - (k_z - pq)^2\right]\mu_p = \varepsilon \sum_{p_1=-\infty}^{\infty} \mu_{p_1} \rho_{p-p_1}, \qquad (14)$$

Будем рассматривать волны, распространяющиеся только вдоль оси z. Уравнение для μ_{p_1} будет выглядеть следующим образом

$$\left[v - (k - p_1 q)^2\right]\mu_{p_1} = \varepsilon \sum_{p_2=-\infty}^{\infty} \mu_{p_2} \rho_{p_1-p_2}, \qquad (15)$$

Выразим μ_{p_1} из этого уравнения и подставим в уравнение (14), получим

$$\left[v - (k - pq)^2\right]\mu_p = \varepsilon^2 \sum_{p_1} \sum_{p_2} \frac{\mu_{p_2} \rho_{p_1-p_2} \rho_{p-p_1}}{v - (k - p_1 q)^2}, \qquad (16)$$

Уравнение решается с помощью теории возмущений. Учитываем только слагаемое с $p_2 = p$ во второй сумме. Предполагается, что волновой вектор может принимать значения $k = \sum_{n=0}^{\infty} k_n = \frac{nq}{2}$, где n – целое число.

Закон дисперсии, соответствующий основному решению (при p=0) будет таким

$$v - k^2 = \varepsilon^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\rho_n \rho_{-n}}{v - (k - nq)^2}, \qquad (17)$$

Следует заметить, что n соответствует номеру зоны Бриллюена и может принимать только нечетные значения, так как уравнение для спектра спиновых волн на границах четных зон должно быть более высокого порядка. Рассмотрим n-ю зону, для этого в уравнении (17) заменим индекс p_1 на n. Уравнение (17) дает общий вид зависимости $\omega = \omega(\mathbf{k})$. Рассматриваем малые модуляции анизотропии, то есть $\varepsilon/v << 1$, тогда

$$(v - k^2)(v - (k - nq)^2) = \rho_n \rho_{-n}, \qquad (18)$$

Отсюда можно получить выражение запрещенной зоны частот спектра на границе n-ой зоны:

$$\Delta v_n = v_n^+ - v_n^- = \sqrt{(k^2 + (k - nq)^2)^2 - 4(k^2(k - nq)^2 - \rho_n \rho_{-n}} \qquad (19)$$

Чтобы получить спектр волн, остается только подставить в уравнение (19) коэффициенты ряда Фурье $\rho_n = \frac{1}{2L} \int_{-L/2}^{L/2} \rho \exp(inx) dx$.

Предполагается, что толщины однородных слоев одинаковы и равны d. Толщина переходных слоев определяется как $\delta = d_2 - d_1 = d_4 - d_3$. Введем обозначение $\ell = \delta / L$. . С учетом этого аналитическое интегрирование для линейной и синусоидальной модуляции дает :

$\rho_a = \frac{\ell}{\pi^2 n^2}\left[\sin\left(\frac{\pi n}{\ell}\right) - \sin\left(\frac{\pi n(\ell - 1)}{\ell}\right)\right]$ - для линейного распределения анизотропии.

$\rho_b = \frac{\ell^2}{(\ell^2 - 4n^2)\pi n}\left[\cos\left(\frac{\pi n}{\ell}\right) - \cos\left(\frac{\pi n(\ell - 1)}{\ell}\right)\right]$ - для синусоидального распределения.

Для модели, описываемой эллиптическим синусом ρ_c значения коэффициентов ρ_n были получены численно.

Обсуждение результатов. Выводы

График зависимости ширины запрещенной зоны от величины размытости представлен на рис. 2.

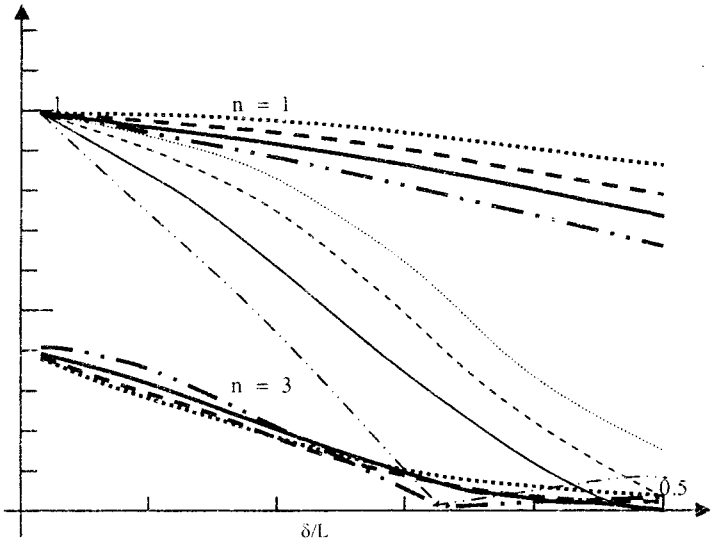


Рис. 2. Зависимость ширины запрещенной зоны $\Delta\Omega_n/\Delta\beta$ от величины δ/L для первой и третьей зон Бриллюена, более тонкими линиями показано отношение $3\Delta\Omega_3/\Delta\Omega_1$, которое позволяет исключить из рассмотрения $\Delta\beta$

Видно, что ширина запрещенных зон убывает с увеличением размытости межслойный границ, что согласуется с результатами работ [10-14]. Однако при больших размытостях будет играть роль структура переходных областей, как и в случае точного решения для линейного и синусоидально профилей, найденного в [16, 17].

Таким образом, на основании спектральных измерений размеров запрещенных зон нельзя делать вывод о толщине межслойной границы (так как это предложено в [10]), без уточнения структуры границы – координатной зависимости величины одноосной анизотропии в переходном слое и выбора соответствующей модели.

Благодарности

В заключение авторы выражают благодарность Кругляку В.В. за полезные замечания при обсуждении результатов работы.

РЕЗЮМЕ

У роботі проведено розгляд спектра обмінних спінових хвиль у магнонному кристалі з періодично модульованою величиною одноосьової анізотропії. Запропоновано модель із синусоідальним розподілом величини анізотропії в перехідному шарі. Знайдено залежність ширини заборонених зон у спектрі від відношення товщини перехідного шару до періоду мультишарового матеріалу. Проведено порівняння спектра спінових хвиль для магнонного кристала з синусоідальною координатною залежністю величини анізотропії в перехідному шарі й із залежністю, описуваною еліптичним синусом. Обговорено вплив характеру розподілу параметрів матеріалу в перехідному шарі на спектр спінових хвиль.

SUMMARY

In this paper spectrum of exchange spin waves in the multilayer magnetic material with the periodically modulated value of the uniaxial anisotropy (magnonic crystal) with final thickness of interlamination boundaries is described. The profile with anisotropy value at the interface varies sin-like is proposed. The dependence of the size of the band gaps at the Brillouin zone boundaries upon the interface thickness are found for this anisotropy profile. The comparison of spin waves spectrum for sin-like profile and profile that can be described with elliptical sine of Jacobi is done. The effect of the shape of the interfaces distribution of the MC's material parameters upon its spin wave spectrum is discussed.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гуляев Ю.В., Никитов С.А. Магнонные кристаллы – спиновые волны в периодических структурах // Доклады Академии наук (Россия). – 2001. – Т. 380. – № 4. – С. 469-471.
2. Косевич А.М. О простой модели фотонного или фононного кристалла // Письма в ЖЭТФ. – 2001. – Т. 74, № 11. – С. 633.

3. Лалетин О.Н. Спектр спиновых и упругих волн в периодических мультислойных структурах // Автореферат дисс. Кандидата физ.-мат. наук. - Красноярск, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН. – 2007.
4. Khitun A., Bao M., Lee J-Y., Wang K.L., Lee D.W., Wang S., Roshchin I.V. Inductively Coupled Circuits with Spin Wave Bus for Information Processing // arXiv:0705.3864 [cond-mat.other]. 2007.
5. 1Schneider T., Serga A.A., Leven B., Hillebrands B., Stamps R.L., Kostylev M.P.Realization of XNOR and NAND spin-wave logic gates // arXiv:0711.4720 [cond-mat.other]. 2007.
6. Stapele R.P., Greidanus F.J.A.M., Smits J.W. The spin-wave of layered magnetic thin films // J. Appl. Phys. 1985, V.57, № 4. – P. 1282-1290.
7. Гуслиенко К.Ю. Спин-волновые моды в обменно связанных многослойных магнитных ленках // Физика твердого тела. – 1995. – Т. 37. – № 6. – С. 1603-1611.
8. Горобец Ю.И., Зюбанов А.Е., Кучко А.Н., Шеджури К.Д. Спектр спиновых волн в магнетиках с периодически модулированной анизотропией // Физика твердого тела. 1992. – Т. 34. – № 5. – С. 1486-1490.
9. Кругляк В.В., Кучко А.Н., Финохин В.И. Спектр спиновых волн в идеальном мультислойном магнетике при модуляции всех параметров уравнения Ландау-Лифшица // Физика твердого тела. 2004. – Т. 46. – № 5. – С. 842-845.
10. Kruglyak V.V., Kuchko A.N. Spectrum of spin waves propagating in a periodic magnetic structure // Physica B 339 (2003) 130–133.
11. Ignatchenko V.A., Mankov Yu.I., Maradudin A.A. The spectrum and damping of waves partially randomized multilayers // J. Phys.: Condens. Matter. - 1999. - V. 11. - P. 2773-2790.
12. Кругляк В.В., Кучко А.Н. Влияние модуляции магнитной вязкости на затухание спиновых волн в мультислойных магнитных системах // Физика металлов и металловедение. – 2001. – Т. 92. – № 3. – С. 3-6.
13. Ignatchenko V.A., Mankov Yu.I., Maradudin A.A. Effects of one- and three-dimensional inhomogeneities on the wave spectrum of multilayers with finite interface thicknesses // Physical review B. 2001. V. 65. – P. 024207.
14. Ignatchenko V.A., Mankov Yu.I., Maradudin A.A. Effects of one- and three-dimensional inhomogeneities on the wave spectrum of multilayers with finite interface thicknesses // Physical review B. 2001. V. 65, P. 024207.
15. Горобец Ю.И., Зюбанов А.Е., Кучко А.Н., Шеджури К.Д. Спектр спиновых волн в магнетиках с периодически модулированной анизотропией // Физика твердого тела. 1992. – Т. 34. – № 5. – С. 1486-1490.
16. Кучко А.Н., Ткаченко В.С. Влияние структуры межслойных границ на спектр спиновых волн в магнонном кристалле // Металлофизика и новейшие технологии. – 2005. – Т.27, Вып.9. – С.1157-1167.
17. Tkachenko V.S., Kruglyak V.V., Kuchko A.N. Spin waves in magnonic crystal with sin-like interfaces // JMMM. – 2006. – V.307,№.1. – P.48-52.
18. Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., Пелетминский С.В. Спиновые волны. Наука, М. (1967).
19. Kuchko A.N., Tkachenko V.S. Spectrum of spin waves in magnonic crystals with small anisotropy modulation for different interface profiles // ICFM, 2005.
20. Карпов С.Ю., Столяров С.Н. Распространение и преобразование волн в средах с одномерной периодичностью // Успехи физических наук. – 1993. – Т. 163, № 1. – С. 63-89.

Надійшла до редакції 12.11.2007 р.

УДК 538.22.1

ВЛИЯНИЕ ТЕПЛОВЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ НА РЕЛАКСАЦИЮ ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ

В.Д.Пойманов, В.И.Финохин

Хорошо известно, что в высокоанизотропных ферромагнетиках, ввиду наличия щели в спектре спиновых возбуждений, амплитуда излучения объемных спиновых волн (СВ) при рассеянии доменных границ (ДГ) на структурных дефектах содержит множитель, экспоненциально убывающий с ростом анизотропии. Вследствие этого основным механизмом релаксации в высокоанизотропных магнетиках является неупругое рассеяние ДГ на структурных дефектах [1-6]. При этом кинетические свойства ДГ в значительной степени определяются кинетическими свойствами подсистемы дефектов [3-4]. Особенно ярко это проявляется в квазиодномерных магнетиках, вследствие отсутствия в спектре ДГ поверхностных мод.

В данной работе, в рамках метода адиабатического исключения быстрых переменных [7-12], рассматривается влияние дефектов, характерные размеры которых малы в сравнении с толщиной ДГ, на кинетические свойства доменных границ. Взаимодействие дефектов с ДГ предполагается слабым, а скорость ДГ-достаточно малой, чтобы излучением объемных СВ можно было пренебречь.

Уравнения движения изолированного дефекта, с учетом взаимодействия с термостатом, имеют вид [7]:

$$\ddot{x} + 2\lambda\dot{x} + \omega^2 x = f(\tau) \tag{1}$$

где λ – декремент затухания, ω – частота собственных колебаний, $f(\tau)$ – случайная сила со спектром белого шума:

$$\langle f(\tau)f(\tau')\rangle_T = \sigma\delta(\tau - \tau') \tag{2}$$

Здесь и ниже $<\ldots>_T$ означает усреднение с равновесной функцией распределения подсистемы дефектов (термостата).

Уравнению движения (1) соответствует уравнение Фоккера – Планка для функции распределения дефекта [7, 12]:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = L_T\rho = -\frac{\partial}{\partial x}up + \frac{\partial}{\partial u}\left(\omega^2 x + 2\lambda u\right)\rho + \frac{2\lambda T}{m}\frac{\partial^2\rho}{\partial u^2} \tag{3}$$

где L_T – оператор Фоккера-Планка для дефекта, $u \equiv \dot{x}$ и учтено, что $\sigma = 4\lambda T/m$, где m – масса дефекта.

Двухвременные корреляционные функции для уравнения (3) имеют вид [13]:

$$\langle x(t)x(0)\rangle_T = \langle x^2(0)\rangle_T\left(\cos\Omega t + \frac{\lambda}{\Omega}\sin\Omega t\right)e^{-\lambda t} \tag{4}$$

$$\langle u(t)x(0)\rangle_T = -\langle x^2(0)\rangle_T\frac{\omega^2}{\Omega}\sin\Omega t e^{-\lambda t}$$

где $\Omega = \sqrt{\omega^2 - \lambda^2}$, а стационарная функция распределения

$$\rho(T) = \frac{m\omega}{2\pi T}\exp\left(-\frac{m\left(\omega^2 x^2 + u^2\right)}{2T}\right) \tag{5}$$

Взаимодействие дефектов может быть учтено переходом к нормальным модам

$$x(y,t) = x(t)\exp(iky) \tag{6}$$

где $x(t)$ определяется уравнением (3), в которых, однако $\omega = \omega(k)$. Потенциал взаимодействия с ДГ в этом случае может быть записан в виде

$$V = \int x(y,t)f(p, R-y)dy = x(t)\int dk f(k)e^{ikR} + \text{э.с.} \tag{7}$$

В частности, для энергии магнитоупругого взаимодействия ДГ в квазиодномерном случае имеем [14-15]

$$f(P, R-y) = \lambda_{11}M_y^2 = \lambda_{11}M_0^2\sin^2(P/2)\sec h^2(R-y) \tag{8}$$

где λ_{11} – константа магнитоупругого взаимодействия, M_y – проекция вектора намагниченности.

Важно отметить, что поскольку переход к нормальным модам является каноническим преобразованием, а $f(\tau)$ – случайная сила со спектром белого шума, двухвременные корреляционные функции для $x(y,t)$ имеют вид:

© Пойманов В.Д., Финохин В.И.

$$\langle x(t,y)x(0,\tilde{y})\rangle_T = \langle x(t)x(0)\rangle_T \delta(y-\tilde{y}) \tag{9}$$
$$\langle u(t,y)x(0,\tilde{y})\rangle_T = \langle u(t)x(0y)\rangle_T \delta(y-\tilde{y})$$

Уравнение для совместной функции распределения границы раздела и подсистемы дефектов может быть представлено в виде [7]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = (L_T + L_S + \varepsilon L_V)\rho \tag{10}$$

где $L_i\rho = \{H_i, \rho\}$ – оператор Лиувилля, соответствующий H_i, H_S – функция Гамильтона границы без учета взаимодействия с термостатом и H_V – потенциал взаимодействия.

Учитывая, что характерный радиус взаимодействия границы с дефектом много больше постоянной решетки, а амплитуда тепловых колебаний дефекта – мала в сравнении с постоянной решетки, ограничиваясь линейным по отклонения дефекта от положения равновесия приближением, для потенциала взаимодействия, ограничиваясь линейным приближением, имеем

$$V = \sum_i U(x_i - R) \approx \sum_i \left(U(x_i^0 - R) + \Delta x_i F(x_i^0 - R)\right) \tag{11}$$

После усреднения по случайному (пуассоновскому) распределению дефектов, зависимость от R в первом слагаемом исчезает и, таким образом, оно может быть опущено как несущественная постоянная.

Определим оператор проектирования следующим образом [10]

$$P\rho = \rho_T^0 \langle \rho \rangle_T \tag{12}$$

Нетрудно убедиться, что P обладает следующими свойствами

$$P^2 = P\,,\ L_T P = P L_T = 0 \tag{13}$$

кроме того, очевидно, что

$$[L_S, P] = 0 \tag{14}$$

Представим ρ в виде

$$\rho = f + g \tag{15}$$

где

$$f = P\rho\,,\ g = (1-P)\rho \tag{16}$$

Для дальнейшего заметим также, что

$$(1-P)^2 = (1-P) \tag{17}$$

Используя (10), для преобразования Лапласа f и g получаем следующую систему уравнений

$$s\tilde{f}(s) - f(0) = L_S \tilde{f}(s) + \varepsilon P L_V \tilde{g}(s) \tag{18}$$
$$s\tilde{g}(s) - g(0) = (L_S + L_T + \varepsilon(1-P)L_V)\tilde{g}(s) + \varepsilon(1-P)L_V \tilde{f}(s)$$

Отсюда для преобразования Лапласа f находим

$$s\tilde{f}(s) - f(0) - \varepsilon P L_V (s - L_S - L_T - \varepsilon(1-P)L_V)^{-1} g(0) =$$
$$(L_S + \varepsilon^2 P L_V (s - L_S - L_T - \varepsilon(1-P)L_V)^{-1}(1-P)L_V)\tilde{f}(s) \tag{19}$$

Слагаемое с $g(0)$ в этом уравнении представляет собой поправку к начальному условию для f и на временах больших в сравнении с временем релаксации термостата может быть опущено. Тогда, выполняя для (19) обратное преобразование Лапласа, получим замкнутое эволюционное уравнение для f

$$\frac{\partial f(t)}{\partial t} = L_S f(t) + \varepsilon^2 P L_V \int_0^\infty d\tau \exp\left[(L_S + L_T)\tau\right](1-P)L_V f(t-\tau) \tag{20}$$

Для дальнейшего, удобно в уравнении (20) перейти к представлению взаимодействия по переменным границы

$$\tilde{f}(t) = \exp(L_S t) f(t) \tag{21}$$

Действуя на (20) оператором $\exp(-L_S t)$, получаем

$$\frac{\partial \tilde{f}(t)}{\partial t} = \varepsilon^2 P \tilde{L}_V(t) \int_0^\infty d\tau \exp(L_T \tau)(1-P)\tilde{L}_V(t-\tau)\, f(t-\tau) \tag{22}$$

где

$$\tilde{L}_V(t) = \exp(-L_S \tau) L_V(t) \exp(L_S \tau) \tag{23}$$

и учтено, что L_V не зависит от времени явно.

С учетом (11) для оператора L_V получаем

$$L_V = \frac{x_i}{\mu}\frac{\partial F(x_i^0 - R)}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial V} - \frac{1}{m}F(x_i^0 - R)\frac{\partial}{\partial u_i} \tag{24}$$

где μ – эффективная масса границы и $u_i = \dot{x}_i$.

Рассмотрим входящее в (20) выражение

$$P\sum_{i,k}\left[\frac{x_i}{\mu}\left(F'(x_i^0 - R)\right)\frac{\partial}{\partial V} - \frac{1}{m}\left(F(x_i^0 - R)\right)\frac{\partial}{\partial u_i}\right]\cdot \exp(L_T\tau)(1-P)\cdot$$
$$\left[\frac{x_k}{\mu}\left(F'(x_k^0 - R) + F''(x_k^0 - R)V\tau\right)\frac{\partial}{\partial V} - \frac{1}{m}\left(F(x_k^0 - R) + F'(x_k^0 - R)V\tau\right)\frac{\partial}{\partial u_k}\right] \tag{25}$$

Учитывая соотношения

$$\frac{\partial}{\partial u_i}\rho_T^0 = -\frac{m}{T}u_i\rho_T^0, \qquad \exp(L_T\tau)\rho_T^0 = \rho_T^0 \tag{26}$$

$$Px_iP = 0,\ Pu_iP = 0$$

$$\left\langle x_i(t)\cdot\exp(L_T\tau)\cdot x_k(t)\right\rangle = \delta_{ik}\left\langle x_i(t)\cdot x_i(t+\tau)\right\rangle$$

$$\left\langle u_i(t)\cdot\exp(L_T\tau)\cdot x_k(t)\right\rangle = \delta_{ik}\left\langle u_i(t)\cdot x_i(t+\tau)\right\rangle$$

нетрудно видеть, что второе слагаемое в первой квадратной скобке в выражении (25) приводит при усреднении по распределению дефектов к интегралам вида

$$\int \frac{\partial}{\partial u_i} f \prod_k du_k \tag{27}$$

где $f \xrightarrow[|u_i|\to\infty]{} 0$ и, стало быть, обращающимся в нуль.

Далее, учитывая, что производные от потенциала взаимодействия обращаются на бесконечности в нуль, нетрудно видеть, что при усреднении по распределению дефектов обращаются в нуль слагаемые, содержащие произведения вида $F'(x_i^0 - R)F(x_i^0 - R)$ и $F'(x_i^0 - R)F''(x_i^0 - R)$.

В результате, находим

$$\frac{\partial \tilde{f}(t)}{\partial t} = \varepsilon^2 \sum_i \left(\frac{\partial F(x_i^0 - R)}{\partial x_i}\right)^2 \left\{\frac{1}{\mu^2}\int_0^\infty d\tau \left\langle x_i(t)\cdot x_i(t-\tau)\right\rangle \frac{\partial^2}{\partial V^2} + \right.$$
$$\left. \frac{1}{\mu T}\int_0^\infty d\tau\cdot\tau\cdot\left\langle x_i(t)\cdot u_i(t-\tau)\right\rangle \frac{\partial}{\partial V}V\right\}\tilde{f}(t) \tag{28}$$

После интегрирования (28) с учетом (9) по τ, окончательно, получим уравнение Фоккера-Планка для функции распределения

$$\frac{\partial \tilde{f}(t)}{\partial t} = D\left\{\frac{\partial^2}{\partial V^2} + \frac{\mu}{T}\frac{\partial}{\partial V}V\right\}\tilde{f}(t) \tag{29}$$

где

$$D = \varepsilon^2 \frac{2\lambda T}{\mu^2 m\omega^4}\sum_i\left(\frac{\partial F(x_i^0 - R)}{\partial x_i}\right)^2 \tag{30}$$

Наличие слабого продвигающего поля $H_z / \beta M << 1$ может быть учтено добавлением в правую часть (29) слагаемого $-\left(\frac{2H_z}{\beta M}\right)\frac{\partial}{\partial P}\hat{\rho}$.

Из (29) для скорости потерь энергии имеем:

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{E} = -Dv^2/T + \frac{\partial}{\partial p}Dv \tag{31}$$

Для потенциала (8), вычисляя входящую в выражение для D сумму, находим

$$D = \lambda\tilde{\chi}\int\frac{dk|f(k)|^2k^2}{\left[\omega^2(k)-(kv)^2\right]^2+(2\lambda kv)^2},\ \tilde{\chi} = 2T\lambda^2 11/\mu^2 m \tag{32}$$

Нетрудно видеть, что в полученной зависимости коэффициента диффузии от скорости ДГ имеется характерная особенность при $v \to \omega/k$, сглаженная в меру величины коэффициента затухания λ. Это может служить объяснением так называемых «полочек», наблюдаемых экспериментально в зависимости скорости ДГ от величины продвигающего поля [16].

В заключение отметим, что условие применимости метода адиабатического исключения быстрых переменных – малость времени релаксации подсистемы дефектов в сравнении с временем релаксации ДГ, как следует из (29), очевидно выполняется, в случае если взаимодействие дефектов с ДГ является слабым.

РЕЗЮМЕ

Розглянуто вплив крапкових дефектів на кінетичні властивості доменних меж. У рамках методу адіабатичного виключення швидких змінних отримані рівняння типу Фоккера-Планка для функції розподілу меж. Показано, що в залежності коефіцієнта дифузії від швидкості межі є особливість, що може служити поясненням так званих «поличок», спостережуваних експериментально в залежності швидкості ДГ від величини зовнішнього поля.

SUMMARY

The influence of point defects on kinetic properties of domain walls is investigated. In the framework of a method of adiabatic exception of a speedy variable the equations of Fokker-Planck – type for distribution function for wall are received. Is shown, that in dependence of diffusion constant on velocity of wall there is a singularity, which can explain so-called «foreparts» in domain wall velocity dependence on driven field value.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вонсовский С.В. Магнетизм. – М.: Наука, 1977. – 1032.
2. Абызов А.С., Иванов Б.А. Динамическое торможение доменной границы в ферромагнетике. ЖЭТФ – 1979. – Т.76, №5. – С. 1700-1712.
3. Иванов Б.А., Мицай Ю.Н., Шахова Н.В. Взаимодействие движущейся доменной границы с редкоземельной подрешеткой магнитоупорядоченных кристаллов.Письма в ЖТФ – 1984. – Т.10. – №15. – С. 901-904.
4. Лось В.Ф., Мартыненко А.Г. Замкнутое кинетическое уравнение для матрицы плотности подсистемы, взаимодействующей с фононами // ТМФ. – 1983. – Т. 55, № 2. – С. 313-320.
5. Dzhezherya Yu.I., Sorokin M.V. Dissipation of energy of domain 180 degrees boundary in a field of defects // MFNT. – 2004. – V. 26, № 8. – P. 981-996.
6. Горобец Ю.И., Джежеря Ю.И., Финохин В.И. Движение 180° доменной магнитной стенки в поле случайно распределенных дефектов // ФТТ. – 1993. – Т. 35, № 2. – С. 335-342.
7. Гардинер К.В. Стохастические методы в естественных науках. – М.: Мир, 1986. – 528 с.
8. Ambegaokar V. Quantum Brownian Motion and its Classical Limit // Bet. Burlsenges. Phys. Chein. – 1991. – V. 95. – P400-404.
9. Caldeira A., Leggett A.J Influence of damping on quantum interference: an exactly soluble model // Phys. Rev. A. – 1985. – V. 31, № 2. – P. 1059-1066.
10. Gardiner C.W., Quantum Noise. – Berlin: Springer-Verlag, 1991.
11. Leggett A.J. et al. Dynamics of the dissipative two-state system // Rev. Mod. Phys. – 1987. – V. 59, P. 1-85.
12. van Kampen N.G. Stochastic Processes in Physics and Chemistry. – Amsterdam: North-Holland, 1992
13. Мазманишвили А.С. Некоторые континуальные интегралы от гауссовых форм: Препринт №85-18/ АН УССР ХФТИ. – М., 1985. – 44 с.
14. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. – М.: Наука, 1982. – 620 с.
15. Крупичка С. Физика ферритов. – М.: Мир, 1976. – 504 с.
16. Малоземов А., Слонзуски Дж. Доменные стенки в материалах с цилиндрическими магнитными доменами. – М.: Мир, 1982. –382 с.

Надійшла до редакції 06.12.2007 р.

УДК 538.945

АНАЛИЗ ДВИЖЕНИЯ ВИХРЕВОЙ СИСТЕМЫ В ЖЕСТКИХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ ВТОРОГО РОДА ПО РЕЗУЛЬТАТАМ МАГНИТООПТИЧЕСКОГО ИЗУЧЕНИЯ ЛАВИН МАГНИТНОГО ПОТОКА

В.Ф.Русаков. В.В.Чабаненко, С.В.Васильев*,*
**Донецкий физико-технический институт*

На основе оригинальных результатов, полученных при изучении лавин магнитного потока методом магнитной визуализации (Goodman B., Wertheimer M.R. 1965,. Harrison R.B., Write L.S., Wertheimer M.R. 1973), рассчитаны скорости фронтов потока и глубина его проникновения, как функции времени, для различных сверхпроводящих материалов. Показано, что скорость фронта потока имеет осциллирующий характер. Частота осцилляций и величина скорости зависят от физических параметров материала.

Введение

Лавинное движение вихревой системы в жестких сверхпроводниках второго рода, возникшее вследствие термомагнитной нестабильности, сопровождается сложным динамическим поведением. В частности, оно выражается в неординарном поведении границы мейсснеровского и смешенного состояния, определяемого, как фронт магнитного потока. Такие необычные электродинамические свойства сверхпроводников второго рода изучались датчиками Холла, индуктивными, магнитооптическими и акустическими методами [1-5]. Были зафиксированы гигантские скачки магнитной индукции, затухающие осцилляции индукции, резкие изменения в ультразвуковом поглощении и другие эффекты. Для изучения явлений, сопровождающих скачки магнитного потока, в частности скорости распространения лавины, нами тщательно проанализированы результаты по визуализации лавин магнитного потока, полученные в работах [1-2]. Их авторы представили магнитооптические изображения образца, полученные в процессе развития термомагнитной лавины. Были обнаружены некоторые особенности в поведении магнитного потока в процессе вхождения лавины, и после ее завершения. В настоящей работе представлены результаты изучения динамики фронта магнитного потока, полученные на основе анализа распределения магнитной индукции в сверхпроводящих образцах (Nb, NbZr) в процессе вхождения лавин магнитного потока.

Результаты

Изучение процессов термомагнитных нестабильностей в жестких сверхпроводниках второго рода является довольно сложной проблемой. Одним из основных методов изучения таких явлений является метод магнитооптической визуализации [5]. Измерение распределения магнитного поля в сверхпроводящем образце при различных температурах основано на эффекте Фарадея и осуществляется с помощью детектора, который вращает плоскость поляризации линейно поляризованного света, причем угол вращения плоскости поляризации пропорционален магнитному полю. Таким методом может быть измерена компонента магнитного поля, перпендикулярная к поверхности сверхпроводящего образца.

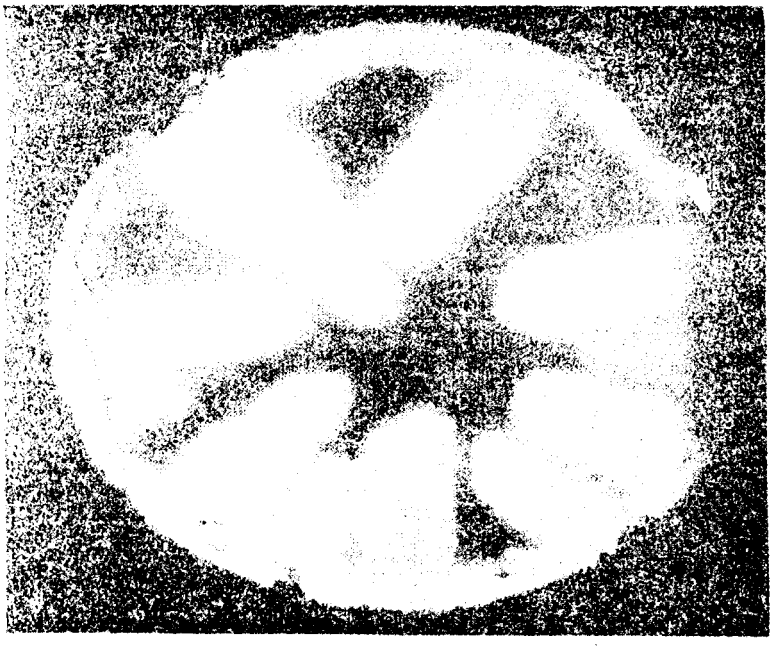


Рис. 1. Скачки потока в чистом холоднокатаном сверхпроводящем ниобиевом диске диаметром 13 мм и толщиной 0.1 мм [1]

В работах [1-2] изучалось движение термомагнитных лавин в тонком ниобиевом диске, диаметром 13 – 15 мм при наложении внешнего магнитного поля превышаю-

© Русаков В.Ф., Чабаненко В.В., Васильев С.В.

щего первое критическое поле сверхпроводника при температуре T = 1.8K. Внешнее магнитное поле было параллельно оси z, направленной перпендикулярно плоскости диска. Типичный вид полученных изображений представлен на рис.1. Здесь представлена картина распределения магнитной индукции на поверхности диска в возрастающем внешнем магнитном поле, начиная с Мейсснеровского состояния. На фотографии хорошо видно, что лавины в массивных сверхпроводниках образуют, так называемую, «пальцеобразную» структуру, в отличие от дендритной структуры, которая образуется в тонких сверхпроводящих пленках [7]. Видно, что лавины зарождаются на границе Мейсснеровского состояния, причем каждая последующая лавина магнитного потока обтекает уже застывший, запиннингованный фронт предыдущей. Анализ подобных фотографий проникновения магнитного потока, позволяет получить распределение сверхпроводящих токов, текущих в сверхпроводнике после вхождения лавины, а также установившееся распределение магнитной индукции [5]. А применение скоростной фотографии позволяет изучать развитие процесса во времени, а также установившееся после исчезновения градиентов температуры на завершающем этапе процесса «застывшее» распределение магнитной индукции.

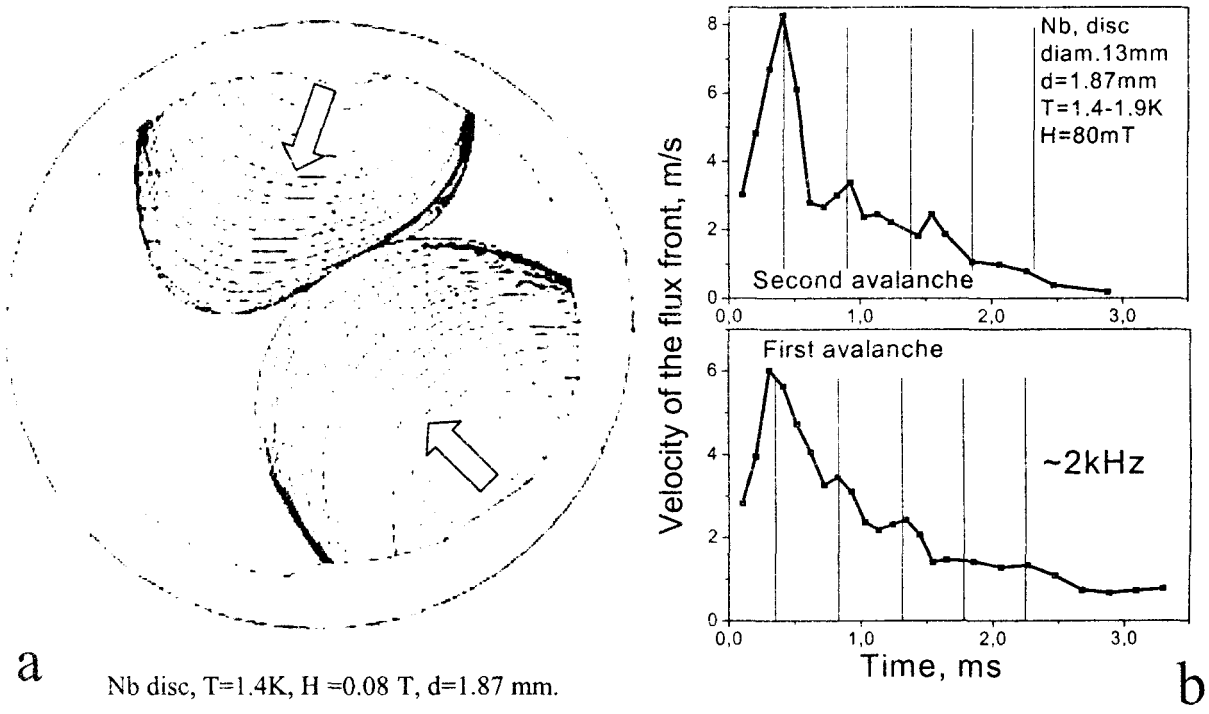


Рис.2. Положение фронта потока, как функции времени a) [6]. Рассчитанная нами скорость фронта потока для двух последовательных скачков потока, как функция времени b)

С целью определения временной зависимости скорости фронта потока нами проведен анализ результатов магнитооптических исследовании выполненных с помощью скоростной кинокамеры в работах [6,8]. На рисунках 2a и 3b представлено последовательное положение фронта проникающих лавин магнитного потока, как функции времени. На рис.2a, показаны две последовательные лавины в ниобиевом диске [6]. Лавины наблюдались в магнитном поле H = 0.08T при температуре T = 1.4K. Контурами показано последовательное положение фронта лавин, временной интервал между измерениями составлял 103 μs. Стрелки указывают направление распространения лавин. Хорошо видна отмеченная выше особенность распространения лавины: вторая, верхняя лавина, в процессе вхождения обтекает область уже занятую первой. Временной интервал между первой и второй лавинами составляет примерно 7 ms. Неравномерность расположения контуров, определяющих положение фронта лавины, показывает, что фронт лавины движется неравномерно. Фотография взята из работы [6]. Исходя из представленных данных, нами была рассчитана скорость движения фронта лавины. Результаты расчета представлены на рис.2b. На рисунке 3b представлен первый скачок потока в диске Nb-25at.%-Zr, (рисунок взят из работы [8]). Скачок регистрировался при температуре T = 1.4K, в магнитном поле H = 0.21. Последовательные положения фронта потока фиксировались кинокамерой через 98μs. Здесь, как и в предыдущем случае, движение фронта является неравномерным. На рисунке 3a, представлены наши результаты расчета глубины проникновения и скорости фронта потока, как функций времени. Несмотря на то, что результаты, представленные на рисунках 2 и 3 получены для образцов из различных сверхпроводящих материалов, а также на то, что

скачки происходят в различных магнитных полях, структура этих скачков имеет много общего. Скорость фронта и в первом и во втором образцах имеет осциллирующий характер. Различаются образцы и характерным временным масштабом изменения скорости. Характерная частота изменения скорости фронта потока в ниобиевом образце составляет порядка 2 kHz и, в пределах погрешности, как видно из рисунка, не зависит от номера скачка (рис.2b). Для диска из Nb-25at.%-Zr, эта величина составляет порядка 3 kHz (рис.3a). Кроме того, из
полученных графиков видно, что с увеличением глубины проникновения, скорость потока замедляется. Возможно, это связано с тем, что по мере вхождения потока в движение вовлекается все большее число вихрей и возрастает роль сил вязкого трения, что и приводит к уменьшению скорости вхождения потока. Наряду с этим фактором, уменьшается также величина «давления» внешнего магнитного поля на мейсснеровское состояние, определяемая градиентом индукции, т.е. ускоряющая магнитный поток сила. Для рассмотренных образцов различаются и сами значения скоростей, что, по-видимому, является следствием различия в них величин сил пиннинга и сил вязкого трения, определяемых, в основном, значением электросопротивления материала.

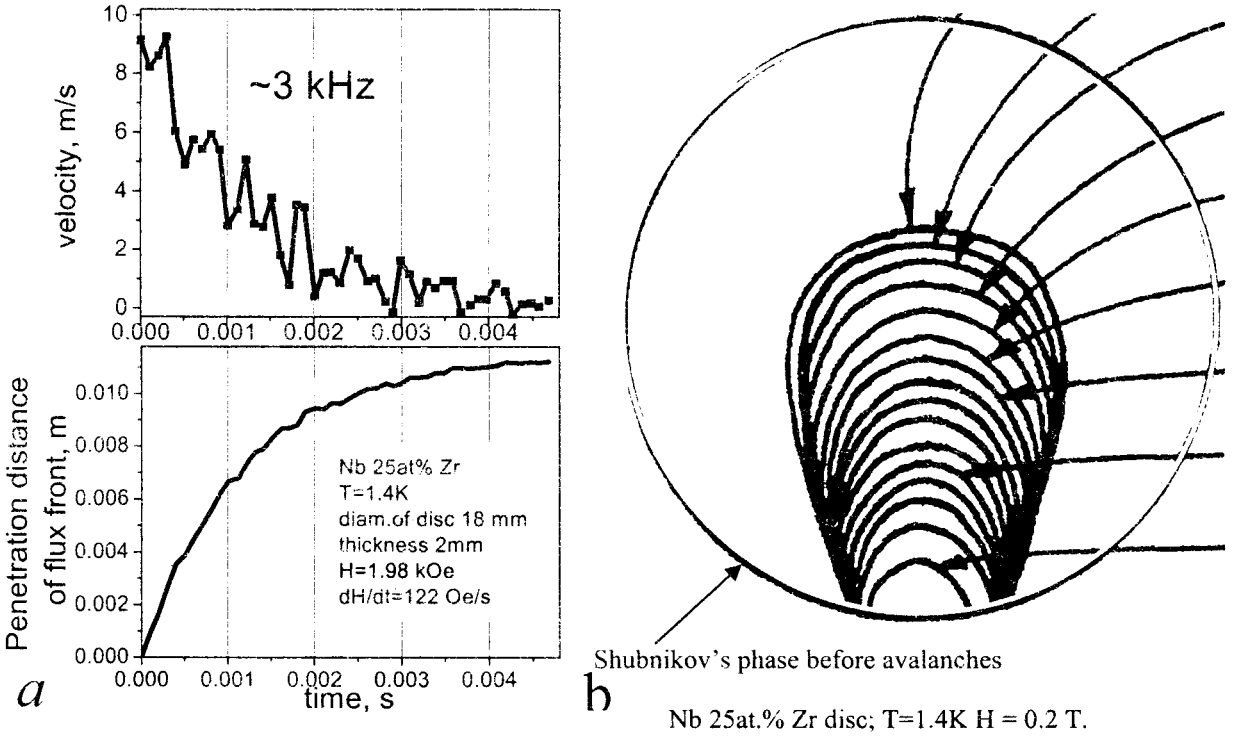


Рис. 3. Положение фронта первого скачка потока в диске Nb-25-at.%-Zr [8] Слева: глубина проникновения и скорость фронта для этого скачка потока

Выводы

1. Проведен анализ проникновения лавин магнитного потока в жесткие сверхпроводники второго рода. Рассчитана скорость движения фронта магнитного потока, входящего в образец в процессе лавины.
2. Показано, что скорость максимальна на начальном этапе лавины и осциллирующим образом уменьшается по мере увеличения глубины проникновения в образец.
3. Частота осцилляций и величина скорости зависит от физических характеристик материала.

РЕЗЮМЕ

На підставі оригінальних результатів, отриманих при вивченні лавин магнітного потоку методом магнітної візуалізації (Goodman B., Wertheimer M.R. 1965,. Harrison R.B., Write L.S., Wertheimer M.R. 1973) розраховано швидкості фронтів потоку та глибина його проникнення як функція часу, для різних надпровідних матеріалів. Показано, що швидкість фронту потоку має осцилюючий характер. Частота осциляцій та величина швидкості залежить від фізичних характеристик матеріалу.

SUMMARY

The velocities of magnetic flux fronts and the deeps of its penetration as a function of time for various superconducting materials were calculated on the basis of original results obtained at the studying magnetic flux avalanches by the method of magnetic visualization (Goodman B., Wertheimer M.R. 1965,. Harrison R.B., Write L.S., Wertheimer M.R. 1973). It was shown that the velocity of the flux front has oscillation behavior. The frequency of oscillation and the magnitude of the velocities depend on the physical parameters of the materials.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wertheimer M.R., Gilchrist J. G. Flux jumps in type II superconductors // J. Phys. Chem. Solids. – 1967. – V. 28. – P.2509-2524.
2. Goodman B.B.,. Laceze A., Wertheimer M.R. Un appareil pour l'etude de la cinetique des sauts de flux des supraconducteurs de la deuxiem espece // C.R. Acad. Sc. Paris. – 1966. – V 262. – P.12-15.
3. Nowak E.R.,.Taylor O.W., Li Liu, Jaeger H.M., Selinder T.I. Magnetic flux instability in superconducting niobium rings: Tuning the avalanche behavior // Phys. Rev. B. – 1997. – V. 55. – P.11702.
4. Chabanenko V.V. Rusakov V.F., Vasiliev S., et.al. The Structure of Magnetic Avalanches: Experiment and Model for Avalanche Vortex Matter Penetration // JLTP. – 2003. – V.130. (3/4) – P.165-174.
5. Jooss Ch., Albrecht J.,. Kuhn H., Leonhardt S., Kronmuller H. Magneto-optical studies of current distributions in high-T_c superconductors // Rep. Prog. Phys. – 2002. – V. 68. – P.651-788.
6. Goodman B., Wertheimer M.R. Observation of the speed of flux jumps in superconducting niobium // Phys. Lett. – 1965. – V. 18, N 3. – P 236-238.
7. Shantsev D., Bobyl A., Galperin Y., Yohansen T., Lee S. Size of flux jumps in superconducting films // Phys. Rev. B. – 2005. – V.72. – P.024541.
8. Harrison R.B., Write L.S., Wertheimer M.R. Kinetics of flux jumps in type-II superconductors // Phys Rev. B. – 1973. – V.7, N5. – P.1864-1866.

Надійшла до редакції 18.10.2007 р.

УДК 539.12.172:537.613

ВЛИЯНИЕ ТОЛЩИНЫ МАГНИТНОЙ ПЛЁНКИ С ПОЛОСОВОЙ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРОЙ НА АНИЗОТРОПИЮ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ

Ю.И.Горобец, Е.И.Васько, И.А.Мельничук

Введение.

Упорядоченные магнитные и доменные структуры могут приводить к ориентационным эффектам как заряженных, так и нейтральных частиц, обладающих магнитным моментом [1,2]. Рассеяние заряженных частиц магнитными полями тонких одноосных плёнок с осью лёгкого намагничивания, перпендикулярной их поверхности, содержащих полосовые доменные структуры (ПДС), также может сопровождаться ориентационными явлениями. Как отмечалось в [3], заряженные частицы, двигаясь над образцами с ПДС, могут иметь существенно отличающиеся траектории: каналировать вдоль доменной границы, рассеиваться полем без столкновений с поверхностью пленки (блокировка входа), рассеиваться в поле при однократных или многократных столкновениях с поверхностью. Существование перечисленных особенностей движения является причиной сильной анизотропии распределения по полярному углу рассеяния и кратности их столкновений с поверхностью образца [4]. Эти эффекты обусловлены взаимодействием заряженных частиц с неоднородными магнитными полями регулярной доменной структуры и особенностями рассеяния при непосредственных взаимодействиях частицы с поверхностью. Распределение магнитного поля над образцом, содержащим ПДС, задается периодом этой структуры P_0 и толщиной пленки h, амплитуда этого поля определяется намагниченностью насыщения материала пленки $4\pi M$. Величина P_0 однозначно определяется такими параметрами материала как намагниченность насыщения, обменная константа A и константа одноосной анизотропии K и толщина пленки [5]. Из перечисленного следует, что при выборе конкретного материала толщина пленки является важнейшим параметром, который определяет распределение полей над ПДС и, следовательно, анизотропию рассеяния заряженных частиц.

В [6] численно исследовалось влияние отношения P_0/h на диапазон углов каналирования частиц вдоль доменных границ ПДС. Было показано, что с увеличением значения данного соотношения углы каналирования частиц падают. В работе [7] показано, что толщина плёнки и параметры магнитных материалов существенным образом влияют на анизотропию выхода электронов, эмитированных в присутствии ПДС.

Целью данной работы является изучение зависимости углового интервала блокировки входа и интервала улов рассеяния, от толщины и магнитных параметров плёнки. Практическая ценность такого исследования заключается в определении оптимальных значений толщины плёнок, состоящих из различных материалов, для поиска таких значений h, при которых эффекты анизотропии могут быть более эффективно исследованы экспериментально.

Параметры задачи.

Хорошо известно, что полосовые доменные структуры могут быть сформированы в ряде одноосных материалов, таких как ферриты-гранаты, ортоферриты, кобальт, искусственные многокомпонентные пленки. Для определённости в данной работе вычисления проводятся для плёнок Co и феррита-граната состава $Sm_{1.2}Lu_{1.8}Fe_5O_{12}$. Намагниченность этих материалов отличается на порядок, что позволяет провести сравнение влияния магнитных параметров материала на процесс рассеяния частиц в полях ПДС реальных образцов.

Связь величины P_0 с параметрами материала и толщиной пленки находили в соответствии с данными работы [5] в пределах $0.5 \le P_0/h \le 7$ при $0.008 \le 1/h \le 0.4$, где $l = (AK)^{0.5}/\pi M^2$ – характеристическая длина материала. В данном интервале соотношений P_0/h плёнки имеют реальные разумные толщины. В расчетах использованы следующие значения магнитных параметров пленок: Co – $4\pi M$=17900Гс, $K=5\cdot10^6$ Эрг/см^3 [8], $A=3\cdot10^{-6}$ Эрг/см [9]; $Sm_{1.2}Lu_{1.8}Fe_5O_{12}$ – $4\pi M$ = 1750Гс, l=0.05 мкм [10].

Траектории частиц определялись численным решением уравнений движения. Форма траектории определялась силой Лоренца. Рассеяние при столкновениях частицы с поверхностью считалось зеркальным, потери энергии учитывались модельным образом: $E_1=k\cdot E_0$ (k –const, E_1 и E_0 энергия частицы после и до столкновения соответственно). Подробная геометрия задачи и приближения, используемые в численных расчетах, приведены в [11]. Ориентация падающего пучка задавалась углом скольжения α, измеренным между скоростью частицы и поверхностью пленки, а также азимутальным углом поворота мишени β, измеренным между проекцией скорости частицы на поверхность образца и границей полосового домена. Направление вылета рассеянной частицы – углом вылета δ, измеренным между скоростью частицы и поверхностью пленки. Прицельные параметры в пределах периода ПДС выбирались случайным образом. Для фиксированных условий падения пучка накапливалась статистика из N=1000 траекторий. Расчеты проведены для пучка электронов с энергией 100 эВ. Величина угла $\alpha = 0.5^\circ$ выбрана из тех сооб-

© Горобец Ю.И., Васько Е.И., Мельничук И.А.

ражений, что при малых его значениях ориентационные эффекты ярко проявляются [1-2] и хорошо анализируются в более широком интервале углов β. Увеличение угла α не приводит к существенным качественным изменениям исследуемых распределений.

Результаты.

Анизотропию рассеяния частиц удобно анализировать по зависимости $\delta_n(\beta)$, где каждому значению β ставится в соответствие N точек, соответствующих различным величинам угла вылета δ_n, которые рассчитаны при разных прицельных параметрах. Вычисления показывают, что область изменения δ_n ограничена. На рис. 1 эта область заштрихована, сплошными линиями представлены границы этой области. В этой области можно выделить несколько участков (I – IV) значений β, сильно отличающихся друг от друга по ширине интервала изменения δ_n.

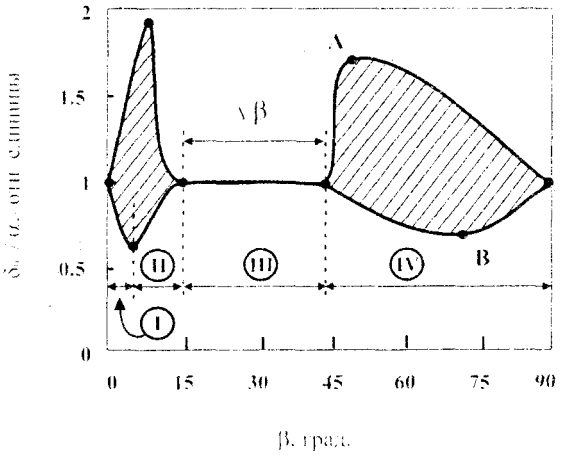


Рис. 1. Область изменения полярного угла вылета электронов, рассеянных плёнкой с ПДС

Участкам I и II соответствуют режимы каналирования и деканалирования частицы, которые уже исследовались в [6], область III соответствует блокировке входа, область IV – кратным столкновениям частицы с поверхностью плёнки. В качестве параметров, характеризующих размеры участков III и IV выступают соответственно ширина интервала блокировки Δβ, а также положения точек максимума – A и минимума – B по δ (возможные максимальный и минимальный углы вылета рассеянной частицы в полярной плоскости). Значения Δβ и координаты точек A и B при разных h представляют результаты данного исследования.

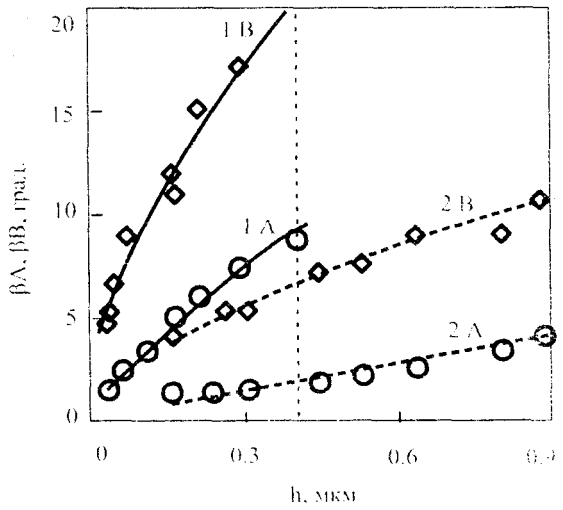


Рис. 2. Зависимости координат максимумов (βA) и минимумов (βB) распределений $\delta_n(\beta)$ от толщины для пленок различного состава. Co – сплошная линия, феррит-гранат – пунктир. Вертикальная пунктирная линия соответствует максимальному значению толщины для Co

На рис. 2 представлены зависимости координаты β максимумов (βA) и минимумов (βB) распределений $\delta_n(\beta)$ от толщины для пленок различного состава. Из рисунка видно, что представленные зависимости являются монотонно возрастающими при всех значениях толщины и для всех образцов. Для Co при изменении толщины плёнки от 0.02 мкм до 0.41 мкм величина βB(h) изменяется от 4.5° до 21°; для величины βA(h) в этом же интервале изменений h соответственно имеем возрастание от 1.5° до 9°. Причем при одинаковых значениях толщины координаты максимума и минимума распределения $\delta_n(\beta)$ для Co большие чем для феррита-граната (например, при h=0.3 мкм для феррит-граната βB(h)=5.5° и 16.5° для Co). Здесь необходимо отметить, что в используемом диапазоне отношений P_0 / h в соответствии с данными [5] плёнка состава феррита-граната достигает толщины 5.9 мкм (на рисунке не показано). При таком значении толщины исследуемые угловые параметры для этой пленки составляют βA=11° и βB=26.5°, что соизмеримо соответствующими значениями, полученными для максимального значения толщины пленки Co. Т.о. при минимальных значениях P_0 / h угловое положение по β минимумов и максимумов в области δ(β) практически не зависит от намагниченности пленки. Кроме того, как видно из рисунка, максимальное отклонение по δ всегда имеет место при меньших величинах угла β, чем его значения, соответствующие рассеянию с минимальным отклонением по δ.

В отличие от зависимостей βA(h) и βB(h), которые имеют одинаковый характер, зависимости δA(h) и δB(h) принципиально отличаются друг от друга. Так, получено, что δA немонотонно зависит от h (рисунок 3), а именно – вплоть до некоторой толщины h значение δA растёт, затем монотонно убывает и выходит на постоянное значение. Возможно, это связано с тем, что зависимость периода ПДС от толщины плёнки является немонотонной и, входя в формулу для распределения полей, эти параметры т.о. определяют полученный характер зависимости δA(h). Максимальное значение δA(h) для Co составляет 1.45° при h=0.044мкм, для феррит-граната максимальное значение δA(h) составляет 1.65° при h=0.44 мкм.

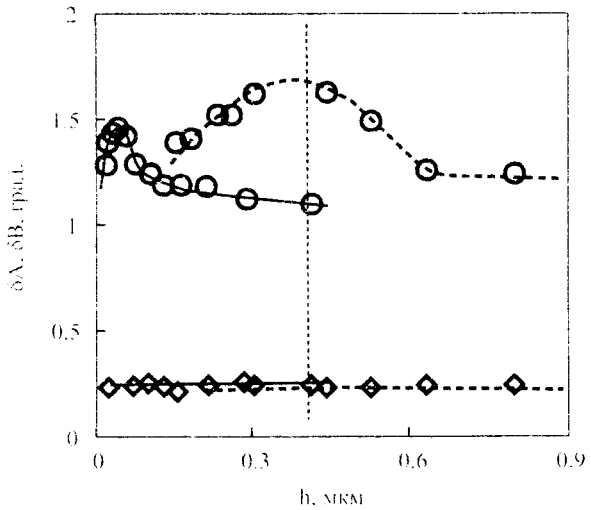


Рис. 3. Влияние толщины плёнки на положение максимума (круги) и минимума (квадраты) в распределении по полярному углу вылета электронов, рассеянных плёнками Co (сплошная линия) и феррит-граната (пунктир)

Из рис. 3 видно, что значения δA, соответствующие феррит-гранату, превосходят, а также имеют больший разброс по сравнению с соответствующими данными по Co. Угловой диапазон изменения δA для Co составляет от 1° до 1.45°, для феррит-граната – пределах от 1.05° до 1.65°. Отметим, что зависимости δA(h), как для Co, так и для феррит-граната имеют одинаковый характер. Отметим, что все показанные на рисунке 3 зависимости при дальнейшем увеличении толщины обоих плёнок остаются практически неизменными.

Переходя к исследованию δB(h), отметим, что угловой диапазон изменения δB при всех значениях h как для Co, так и для феррит-граната, составляет 0.22° и 0.26°. Значения δB и характер зависимости $\delta B(P_0/h)$ позволяют считать их практически не зависящими от толщины пленки. Т.о., в отличие от δA(h), значения δB(h) для плёнок из различных материалов очень слабо отличаются друг от друга.

Перейдем теперь к рассмотрению влияния толщины плёнки на ширину участка Δβ, которому соответствует блокировка входа. Вычисления показывают, что с увеличением h интервал углов блокировки растёт, причем при равных h интервалы углов блокировки для Co больше соответствующих значений для феррита-граната (рис. 4). Так, при h = 0.41 мкм величина Δβ для электронов, рассеянных на плёнке Co, составляет 6.4°, а для феррита-граната этот интервал равен 0.3°. Область существенной блокировки (Δβ > 1°) находится в интервале толщин 0.07 ÷ 0.4 мкм (P_0/h: 0.5 ÷ 1.15) для электронов, рассеянных плёнкой Co, и соответственно плёнкой феррит-граната – в интервале h 0.63÷5.88 мкм (P_0/h: 0.5 ÷ 1.6). В

связи с тем, что в соответствии с [5] в одинаковом интервале отношения P_0/h плёнки $Sm_{1.2}Lu_{1.8}Fe_5O_{12}$ по сравнению с плёнками Со имеют большие толщины, то на рисунке 4 зависимости $\Delta\beta(h)$ для феррит-граната показана не полностью. Характер данной зависимости в диапазоне h от 1.5мкм до 5.88 мм такой же, как при h<1.5мкм. Максимальное значение ширины интервала блокировки при рассеянии электронов на плёнке феррит-гранага (h=5.88мкм) составляет 9.25°. Для Со максимальное значение этого интервала составляет 6.5°. Т.о. при экспериментальном исследовании анизотропии блокировки входа целесообразно использовать плёнки феррита граната больших толщин.

Дополнительные измерения исследуемых параметров от периода ПДС показали, что βA и βB монотонно возрастают с увеличением P_0, а зависимости δA и δB от P_0 имеют тот же характер, что и от h.

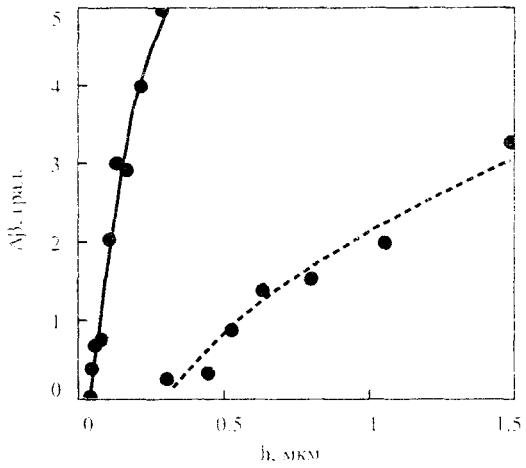


Рис. 4. Влияние толщины плёнки на ширину интервала блокировки рассеянных электронов (Со – сплошная линия, феррит-гранат – пунктир)

Выводы

Таким образом, показано, что при рассеянии электронов магнитной пленкой, содержащей полосовую доменную структуру, угловой интервал блокировки входа и интервал углов вылета рассеянных частиц существенно зависит от толщины образца. Максимальное значение угла вылета немонотонным образом зависит от толщины пленки и практически не зависит от намагниченности материала образца. Величина интервала блокировки входа растет с увеличением толщины пленок и определяется не только значением намагниченности материала, а и другими магнитными параметрами, определяющими значение P_0.

РЕЗЮМЕ

Проведено розрахунки кутового розподілу електронів, що розсіяні поверхнею магнітної плівки, яка містить смугову доменну структуру. На прикладі плівок кобальту та фериту- гранату показано, що зростання товщини плівок приводить до збільшення інтервалу блокування входу. З'ясовано, що максимальне значення кута розсіяння немонотонним чином залежить від товщини плівки.

SUMMARY

The angular distributions of electrons scattered by the surface of the magnetic film, containing stripe domain structure are obtained. It is shown for the instance of the cobalt and ferrite-garnet that an increase in the film thickness leads to the rise of the entrance blocking interval. It is detected, that the maximal value of the scattering angle depends on a film thickness nonmonotonously.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Высоцкий В.И., Кузьмин Р.Н. Каналирование нейтральных частиц и квантов в кристаллах // УФН. – 1992. – Т.162. – №9. – С. 2.
2. Бордовицын В.А., Муравяткин В.Ю., Эпп В.Я. Излучение заряженных частиц в магнитном поле сверхпроводника II рода // СФХТ. – 1991. – Т.4. – №8. – С.1521.
3. Мельничук И.А., Мельничук П.И. Траектории, блокировка входа и каналирование при рассеянии медленных ионов вблизи поверхности одноосной магнитной плёнки с решёткой полосовых доменов // Материалы XV международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью – 2001». – 2001. – С. 204-207.
4. Васько Е.И. Анизотропия рассеяния ионов водорода магнитной плёнкой с решёткой полосовых доменов // Материалы XV международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью – 2001». – 2001. – С. 230-233.

5. Kooy C., Enz V. Experimental and theoretical study of the domain configuration in thin layers of $BaFe_{12}O_{19}$ // Phil. Res. Rep. – 1960. – 15. №1. – P.7.
6. Васько Е.И., Мельничук И.А. Влияние периода полосовой ДС и параметров плёнки на угол каналирования электрона вдоль границы домена // Сборник трудов «Новые магнитные материалы микроэлектроники XIX» (НМММ). – Москва, 2004. – С.847-848.
7. Vasko E.I., Melnichuk I.A. Influence of magnetic film thickness on the escape anisotropy of the electrons emitted in the presence of a stripe domain structure // Vacuum. – 2006. – V. 81. – P.192-195.
8. Таблицы физ. величин. Справочник. Под ред. А.К. Кикоина // М.: – Атомиздат. – 1976. – С.1006.
9. Gu B.X., Wang H. Structure and magnetic properties of sputtered FCC Co(111) films grown on a glass substrate // JMMM 187. – 1998. – P.47-50.
10. Элементы и устройства на ЦМД / Справочник под ред. Евтихиева Н.Н. - М. – 1987. – С.488.
11. Васько Е.И., Мельничук П.И. Влияние ориентации пучка заряженных частиц на распределения по углам вылета при их рассеянии вблизи поверхности с полосовой доменной структурой // Известия РАН. Серия физическая. – 2004. – Т.68. – №3. – С.370-373.

Надійшла до редакції 15.11.2007 р.

УДК 539.2; 541.117

СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ СВЕРХПРОВОДНИК – НОРМАЛЬНЫЙ МЕТАЛЛ – ИЗОЛЯТОР – СВЕРХПРОВОДНИК

А.О.Шебеко, Т.А.Хачатурова,
Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина НАН Украины

Введение.

Явление протекания незатухающего тока в плоской гетероструктуре, образованной двумя сверхпроводящими обкладками, между которыми находится очень тонкая прослойка, состоящая из диэлектрических и нормальных металлических слоев нанометровых толщин, было предсказано Б.Джозефсоном в 1962 г. [1]. Для простоты в дальнейшем будем рассматривать джозефсоновскую структуру, состоящую из двух идентичных сверхпроводников (S), каждый из которых описывается единым комплексным параметром порядка с модулями $\Delta_1=\Delta_2$ и фазами φ_1 и φ_2. Разность квантовомеханических фаз $\varphi=\varphi_1-\varphi_2$ и создает незатухающий ток через всю систему [1]. Каким же образом происходит транспорт зарядов в случае баллистического пролета через прослойку, разделяющую два сверхпроводника, когда длина свободного пробега электронного возбуждения значительно превышает ее толщину *l*? Этот процесс наглядно продемонстрирован на рис. 1. В левом сверхпроводнике ток возникает как результат движения куперовских пар, однако на границе с нормальной прослойкой они распадаются на два отдельных носителя заряда – один занимает энергию ε выше, а другой – (-ε) ниже уровня Ферми (рис. 1). Если первый электрон занимает пустое электронное состояние, так как при нулевой температуре состояния выше уровня Ферми не заняты, то второй электрон заполняет дырку, которая образуется после того, как на правой границе прослойка/сверхпроводник два независимых электрона с энергиями ±ε вновь собираются в куперовскую пару.

Энергии связанных состояний ε не могут быть произвольными, поскольку они находятся в потенциальной яме, образуемой энергиями конденсации $\Delta=\Delta_1=\Delta_2$ в двух обкладках. и, следовательно, должны быть квантованы. Если эти значения известны, то сверхпроводящий ток может быть найден, исходя из формулы, определяющей его через свободную энергию перехода $F(\varphi)$: $I(\varphi)=-(2e/\hbar)\partial F(\varphi)/\partial\varphi$ [2]. Таким образом, вычисление незатухающего сверхпроводящего тока в неоднородной джозефсоновской гетероструктуре сводится к расчету энергий связанных состояний $\varepsilon(\varphi)$. Цель данной работы – расчет таких энергий как функции разности сверхпроводящих фаз $\varphi=\varphi_1-\varphi_2$ для SNIS-гетероструктуры, представленной на рис. 1, которая, как указано в работе [3] является наиболее перспективным элементом для сверхпроводниковой микроэлектроники, основанной на эффекте Джозефсона.

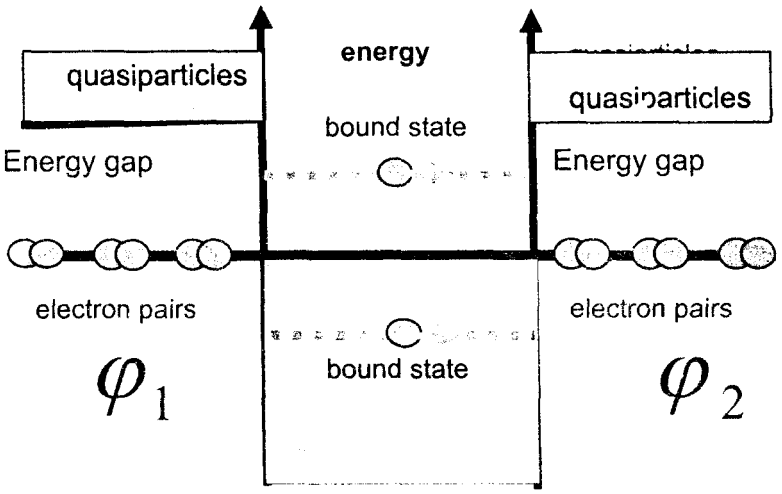


Рис. 1. Схема, иллюстрирующая прохождение незатухающего тока через систему из двух сверхпроводников, разделенных несверхпроводящей прослойкой, образованной пленкой нормального (N) металла и тонким слоем изолятора (I)

Расчет энергий связанных состояний в джозефсоновской гетероструктуре.

В настоящей работе мы ограничимся изучением одномерной ситуации. Волновые функции квазичастичных состояний в сверхпроводнике, которые являются комбинацией электронных и дырочных возбуждений, являются, как известно [2], двухкомпонентными $\psi_+(x)=\begin{pmatrix} u\exp(i\varphi) \\ v \end{pmatrix}\exp(\pm ik^+x)$ и

© Шебеко А.О., Хачатурова Т.А.

$\psi_-(x) = \begin{pmatrix} v\exp(i\varphi) \\ u \end{pmatrix} \exp(\pm ik^- x)$, где $\hbar k^{\pm} = \sqrt{2m(\mu \pm \sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2})}$, $u = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{1+\sqrt{1-(\Delta^2/\varepsilon^2)}}$, $v = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{1-\sqrt{1-(\Delta^2/\varepsilon^2)}}$, μ – химический потенциал, комплексный параметр порядка в сверхпроводнике полагается равным $\Delta\exp(i\varphi)$. В обычном металле, где Δ обращается в нуль, k^+ соответствует электронному волновому вектору k_e: $\hbar k_h = \sqrt{2m(\mu+\varepsilon)}$, а k^- описывает дырочное состояние с импульсом $\hbar k_h = \sqrt{2m(\mu-\varepsilon)}$. Введем далее два вспомогательных несверхпроводящих слоя, разделяющих сверхпроводящие обкладки и промежуточную область джозефсоновского перехода (толщину вспомогательных слоев полагаем бесконечно малой). В каждом слое имеется четыре квазичастичных состояния –два электронных (e) и два дырочных (h), отличающихся тем, что они соответствуют движениям в двух противоположных направлениях. Промежуточную область будем считать «черным ящиком» с известными характеристиками рассеяния – амплитудами отражения электрона и дырки для состояний, падающих на него слева – $r^{\rightarrow}_{e,h}$ и справа – $r^{\leftarrow}_{e,h}$, а также амплитудами прохождения электрона и дырки сквозь него – $t_{e,h}$.

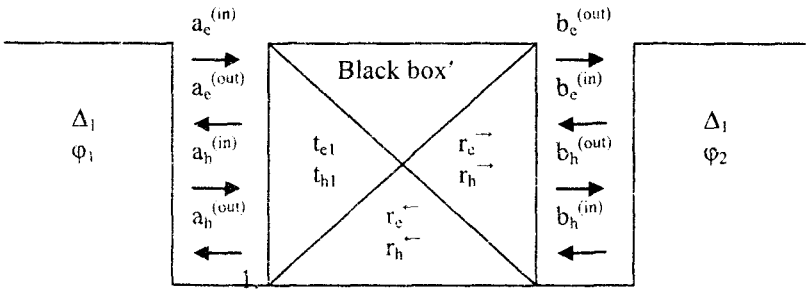


Рис. 2. Схематическое изображение процессов отражения и прохождения электрона и дырки через джозефсоновский переход

Сшивая падающие и отраженные волновые функции друг с другом, получим:

$$\begin{pmatrix} a^{(out)}_{e,h} \\ b^{(out)}_{e,h} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r^{\rightarrow}_{e,h} & t_{e,h} \\ t_{e,h} & r^{\leftarrow}_{e,h} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^{(in)}_{e,h} \\ b^{(in)}_{e,h} \end{pmatrix} \tag{3}$$

Требование унитарности матрицы рассеяния $\begin{pmatrix} r^{\rightarrow}_{e,h} & t_{e,h} \\ t_{e,h} & r^{\leftarrow}_{e,h} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r^{\rightarrow *}_{e,h} & t^{*}_{e,h} \\ t^{*}_{e,h} & r^{\leftarrow *}_{e,h} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ дает следующий результат:

$$\left|r^{\rightarrow}_{e,h}\right|^2 + \left|t_{e,h}\right|^2 = \left|r^{\leftarrow}_{e,h}\right|^2 + \left|t_{e,h}\right|^2 = 1 \qquad \text{и} \qquad r^{\rightarrow *}_{e,h} t_{e,h} + t^{*}_{e,h} r^{\leftarrow}_{e,h} = 0;\ r^{\leftarrow}_{e,h} = -\frac{t_{e,h} r^{\rightarrow *}_{e,h}}{t^{*}_{e,h}} \tag{4}$$

Если ввести коэффициенты отражения и прохождения R и D, то первое условие в соотношениях (4) можно переписать в виде:

$$R_{e,h} = \left|r^{\rightarrow}_{e,h}\right|^2 = \left|r^{\leftarrow}_{e,h}\right|^2;\ D_{e,h} = \left|t_{e,h}\right|^{2^2};\ R_{e,h} + D_{e,h} = 1 \tag{5}$$

Распишем подробнее соотношение (3), полагая заданными амплитуды прохождения и отражения t и r

$$\begin{cases} a^{(out)}_e = r^{\rightarrow}_e a^{(in)}_e + t_e b^{(in)}_e; \\ b^{(out)}_e = t_e a^{(in)}_e + r^{\leftarrow}_e b^{(in)}_e; \\ a^{(out)}_h = r^{\rightarrow}_h a^{(in)}_h + t_h b^{(in)}_h; \\ b^{(out)}_h = t_h a^{(in)}_h + r^{\leftarrow}_h b^{(in)}_h; \end{cases} \tag{6}$$

В четырех уравнениях (6) восемь неизвестных. Недостающие четыре уравнения получим, сшивая волновые функции на границах вспомогательных слоев со сверхпроводящими электродами. Соответствующие выражения были получены ранее в работе [4]:

$$\begin{cases} a_h^{(in)} = r_1^{eh} a_e^{(out)} \\ a_e^{(in)} = r_1^{he} a_h^{(out)} \\ b_h^{(in)} = r_2^{eh} b_e^{(out)} \\ b_e^{(in)} = r_2^{he} b_h^{(out)} \end{cases} \tag{7}$$

Здесь $r_{1,2}^{eh} = Ae^{-i\varphi_{1,2}}$; $r_{1,2}^{he} = Ae^{i\varphi_{1,2}}$, где $A = \exp(-i\arccos(\varepsilon/\Delta))$ [4]. Подставим (7) в (6) и получим четыре уравнения для четырех неизвестных $a_e^{(out)}, b_e^{(out)}, a_h^{(out)}, b_h^{(out)}$:

$$\begin{cases} a_e^{(out)} = r_e^{\rightarrow} r_1^{he} a_h^{(out)} + t_e r_2^{he} b_h^{(out)} \\ b_e^{(out)} = t_e r_1^{he} a_h^{(out)} + r_e^{\leftarrow} r_2^{he} b_h^{(out)} \\ a_h^{(out)} = r_h^{\rightarrow} r_1^{eh} a_e^{(out)} + t_h r_2^{eh} b_e^{(out)} \\ b_h^{(out)} = t_h r_1^{eh} a_e^{(out)} + r_h^{\leftarrow} r_2^{eh} b_e^{(out)} \end{cases} \tag{8}$$

Ненулевые решения системы уравнений (8) возможны при условии обращения в нуль ее детерминанта.

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & -r_e^{\rightarrow} r_1^{he} & -t_e r_2^{he} \\ 0 & 1 & -t_e r_1^{he} & -r_e^{\leftarrow} r_2^{he} \\ -r_h^{\rightarrow} r_1^{eh} & -t_h r_2^{eh} & 1 & 0 \\ -t_h r_1^{eh} & -r_h^{\leftarrow} r_e^{eh} & 0 & 1 \end{vmatrix} = 0$$

Или в раскрытом виде

$$\begin{aligned} &1 - r_e^{\leftarrow} r_h^{\leftarrow} r_2^{eh} r_2^{he} - t_e t_h r_1^{he} r_2^{eh} - r_e^{\rightarrow} r_e^{\leftarrow} r_h^{\rightarrow} r_h^{\leftarrow} r_1^{eh} r_1^{he} r_2^{eh} r_2^{he} - \\ &- r_e^{\rightarrow} r_e^{\leftarrow} t_h^2 r_1^{eh} r_1^{he} r_2^{eh} r_2^{he} - r_e^{\rightarrow} r_h^{\rightarrow} r_1^{eh} r_1^{he} - t_e^2 r_h^{\rightarrow} r_h^{\leftarrow} r_1^{eh} r_1^{he} r_2^{eh} r_2^{he} - \\ &- t_e t_h r_1^{eh} r_2^{he} + t_e^2 t_h^2 r_1^{eh} r_1^{he} r_2^{eh} r_2^{he} = 0 \end{aligned} \tag{9}$$

После ряда преобразований условие (9) может быть сведено к виду

$$\begin{aligned} &1 - 2t_e t_h A^2 \cos\varphi - r_e^{\leftarrow} r_h^{\leftarrow} A^2 - r_e^{\rightarrow} r_h^{\rightarrow} A^2 + \frac{t_e t_h}{(t_e t_h)^*} R_e R_h A^4 + \\ &+ \frac{t_e{}^2 t_h}{t_h{}^*} R_h A^4 + \frac{t_e t_h{}^2}{t_e{}^*} R_e A^4 + t_e{}^2 t_h{}^2 A^4 = 0 \end{aligned} \tag{10}$$

Уравнение (10), которое в неявном виде определяет зависимость энергии связанного состояния от разности сверхпроводящих фаз, является основным результатом данной работы.

Для дальнейших упрощений необходимо конкретизировать структуру промежуточной области и, соответственно, получить конкретные выражения для коэффициентов отражения и прохождения через нее. Далее мы рассмотрим общий случай, когда эта область состоит из двух изолирующих (I) слоев толщиной в несколько нанометров, сквозь которые возможно квантовомеханическое туннелирование носителей заряда, и прослойки чистого нормального (N) металла. Интерес к SINIS джозефсоновским гетероструктурам обусловлен перспективами их практического применения в качестве элементов вычислительной техники нового поколения [5]. Мы используем выражения для амплитуд отражения $r_{1,2} = Z_{1,2}/(i - Z_{1,2})$ и прохождения $t_{1,2} = i/(i - Z_{1,2})$ для первого и второго барьеров, полученные ранее в работе [4] в случае потенциального барьера очень малой толщины, когда его отталкивающий потенциал может быть описан дельта-функцией. Параметры $Z_{1,2}$ характеризуют степень прозрачности барьеров, случай $Z=0$, например, соответствует полному отсутствию барьера, а $Z=1$ –ситуации, когда каждый второй электрон отражается от барьера. В нормальном слое имеет место фазовый сдвиг $\chi=2kd$, k – соответствующая компонента волнового вектора в направлении плоскости перехода. Тогда [4]

$$t_e = t'e^{ikl}t + t'e^{ikl}re^{ikl}r'e^{ikl}t + ... = \frac{t'e^{ik_e l}t}{1 - rr'e^{2ik_e l}}$$

$$t_h = \frac{(t')^* e^{-ik_h l}t^*}{1 - r^*(r')^* e^{-2ik_h l}}$$

$$r_e^{\rightarrow} = r' + \frac{(t')^2 e^{2ik_e l}r}{1 - rr'e^{2ik_e l}} \qquad (11)$$

$$r_h^{\rightarrow} = (r')^* + \frac{(t'^*)^2 e^{-2ik_h l}r^*}{1 - r^*r'^*e^{-2k_e l}}$$

$$r_e^{\leftarrow} = r + \frac{t^2 e^{2ik_e l}r'}{1 - rr'e^{2ik_e l}}$$

$$r_h^{\leftarrow} = r^* + \frac{(t^*)^2 e^{-2ik_h l}r'^*}{1 - r^*r'^*e^{-2ik_h l}}$$

Уравнение (10) вместе с формулами (11) полностью определяет задачу о нахождении энергий связанных состояний в переходе Джозефсона SINIS типа.

Расчет энергий связанных состояний в SNIS джозефсоновской гетероструктуре (вычисления).

В качестве примера использования полученных выше выражений рассчитаем энергии связанных состояний как функции разности сверхпроводящих фаз $\varphi=\varphi_1-\varphi_2$ для частного (однако важного в плане практических приложений) случая SNIS-гетероструктуры. Основными параметрами задачи в данном случае являются прозрачность D изолирующего I слоя и толщина нормальной N прослойки l, которая будет измеряться в единицах сверхпроводящей длины когерентности $\xi = \hbar v_F / \pi\Delta$: $\gamma = l/\xi$. Рассмотрим вначале структуру сверхпроводник-нормальная прослойка-сверхпроводник без диэлектрического слоя, т.е. с D=1. В отличие от известного результата для γ=0 представленного на рис. 3 сплошной линией, при наличии нормальной пленки конечной толщины каждому значению разности фаз φ соответствуют две величины энергии ε. Это означает, что в подобном SNS джозефсоновском переходе возникают два незатухающих тока, которые при некоторых φ могут протекать в противоположных направлениях. Рис. 4 демонстрирует влияние прозрачности изолирующего слоя на зависимость $\varepsilon(\varphi)$ при фиксированной толщине нормальной прослойки γ=0.8. Легко видеть, что с уменьшением прозрачности обе ветви становятся параллельными друг другу, и эффект двух противоположно текущих токов исчезает. При D<0.5 (рис. 4) оба тока текут уже только в одном направлении.

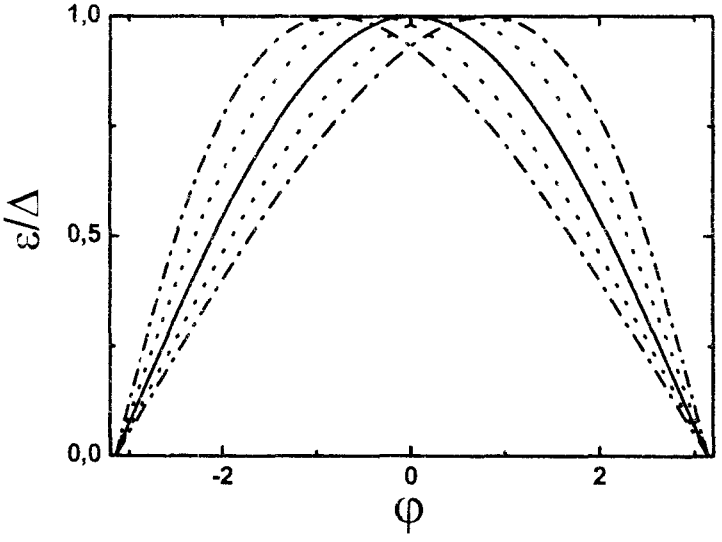


Рис. 3. Зависимость связанных уровней энергии в одномерной SNS-гетероструктуре от разности сверхпроводящих фаз в обкладках перехода: сплошная кривая соответствует γ=0, пунктирные – γ=0.4, штрих-пунктирные γ=0.8

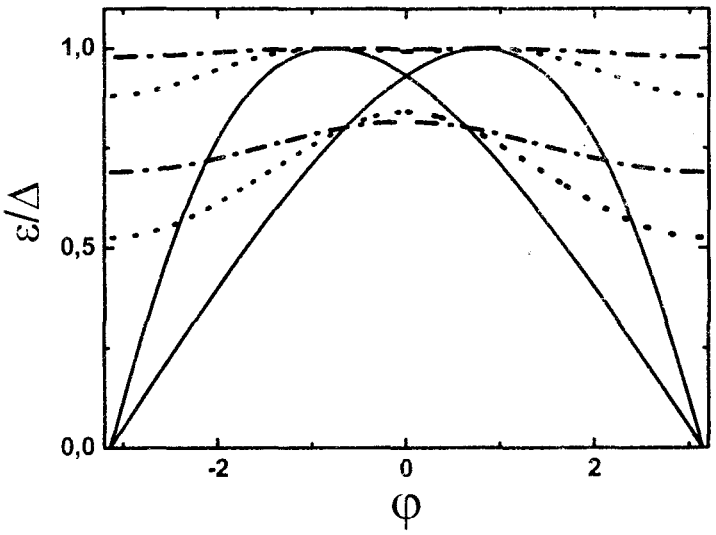


Рис. 4. Зависимость связанных уровней энергии в одномерной SNIS-гетероструктуре (параметр γ=0.8) от разности сверхпроводящих фаз в обкладках перехода: сплошная кривая соответствует D=1, пунктирные – D=0.5, штрих-пунктирные – D=0.2

Авторы выражают искреннюю признательность М.А. Белоголовскому за научное руководство в данной работе.

РЕЗЮМЕ

Вперше розглянуто задачу про залежність зв'язаних енергетичних станів в одновимірній потенціальній ямі, створеній двома надпровідниковими обкладинками, від різниці фаз їх параметрів порядку. Проаналізовані особливості джозефсонівського транспорту в залежності від структури перехідної області між обкладинками.

SUMMARY

A problem of the dependence of bound energy states in a one-dimensional potential well created by two superconducting layers on the difference between their order parameter phases has been studied for the first time. Some features of the Josephson transport depending on the structure of the intermediate region between the layers have been analyzed.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Josephson B.D. Possible new effects in superconductive tunneling // Phys. Lett. – 1962. – Vol. 1. – № 7 – P. 251-253.
2. de Gennes P.G. Superconductivity of Metals and Alloys. New York: Benjamin, 1966. – 274 p.
3. Lacquaniti V., Cagliero C., Maggi S., Steni R. Overdamped Nb/Al-AlO_x/Nb Josephson junctions // Appl. Phys. Lett. – 2005. – Vol. 86. – № 4 – P. 042501–042503.
4. Belogolovskii M.A., Grajcar M., Kus P., Plecenik A., Benacka S., Seidel P. Phase-coherent charge transport in superconducting heterocontacts // Phys. Rev. B – 1999. – Vol. 59. – № 14. – P. 9617-9626.
5. Shaternik V., Belogolovskii M., Plecenik A., Benacka S., Grajcar M., Rudenko E. Asymmetric double-barrier S-I_1-N-I_2-S Josephson heterojunctions: experiment and theory // Physica C. – 2001. – Vol. 350. – № 3-4. – P.187-192.

Надійшла до редакції 29.10.2007 р.

УДК 621.317

ОПРЕДЕЛЕНИЕ БИОИНФОРМАЦИОННОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ОТ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

В.П.Куценко

Введение

Живым организмам наряду с радиотепловым излучением присуще и биоинформационное излучение, которое может использоваться для исследования биологических материалов. Биоинформационное излучение, обеспечивающее информационный обмен между клетками живого организма, слабее радиотеплового и носит стохастичний характер за пределами биообъекта, по спектру оно подобно широкополосному шумовому сигналу [1, 2].

Известно, что при зондировании биообъектов, в результате приема вместе с отраженным сигналом и части широкополосного радиотеплового излучения биологического объекта, возникают паразитные комбинационные составляющие в принятом сигнале, которые являются причиной больших погрешностей при определении биоинформационной составляющей излучения. Благодаря приему отраженного зондирующего сигнала с расширенным спектром за счет боковых составляющих, возникающих как продукты взаимодействия с сигналами биоритмов в нелинейной среде биообъекта, можно получить информацию о биоинформационной составляющей [3, 4].

Однако только в высокоразвитых организмах зафиксированны биоритмы. Поэтому при анализе многих биологических объектов, начиная с более простых, расширение спектра зондирующего сигнала не наблюдается. Кроме того, даже в высокоразвитых биообъектах присутствие собственного радиотеплового излучения вызывает появление комбинационных составляющих в спектре отраженного сигнала, который снижает информационную способность известного способа [5, 6].

Постановка задачи исследования

Из вышеизложенного следует, что для обеспечения измерения интенсивности биоинформационной составляющей биологических объектов различной структуры требуется новый подход к решению данной проблемы, позволяющий обеспечить повышение информационной способности, чувствительности и точности аппаратуры.

Основная часть

Для этого предлагается функциональная схема измерительной системы (рис. 1) [7]. На схеме приняты следующие обозначения: X1-антенна; A1 – волновод; A2 –циркулятор; G1генератор СВЧ-шума; A3, A4 – аттенюаторы; Rd – радиометрический приемник; A5делитель напряжения; A6блок сравнения; G2источник постоянного напряжения; P – индикатор; O – объект исследования; T – термостат; B – радиопрозрачное окно.

Функциональная схема работает по такому принципу. Сначала в контейнер помещают физический (неживой) объект „О", который по излучательной способности близок к абсолютно черному телуАЧТ (например, сажа или платиновая чернь), а контейнер размещают в термостат „Т", в котором поддерживается температура жизнеспособности биологического объекта (35-40°). В установленном термодинамическом равновесии нагретый объект излучает электромагнитную энергию в широком спектре частот. В диапазоне сверхвысоких частот излучательная способность β физического объекта определяется законом Релея-Джинса:

$$B = \frac{2f^2}{C^2} kT\beta, \qquad (1)$$

где f – частота излучений; C – скорость распространения электромагнитных колебаний в вакууме; k – постоянная Больцмана; T – термодинамическая температура; β – коэффициент излучательной способности.

Для АЧТ коэффициент $\beta = 1$. Поэтому физический объект, который имеет свойства АЧТ, излучает наибольшую энергию при заданной температуре объекта $T_0 = const$. Это излучение через радиопрозрачное окно В поступает на антенну X1, затем через циркулятор A2 поступает на вход радиометра, который преобразует мощность колебаний СВЧ в напряжение постоянного тока. В ограниченной полосе частот физический объект с излучательной способностью (1) излучает мощность СВЧ- колебаний:

$$P_1 = k\Delta f T_0, \qquad (2)$$

где Δf – ширина полосы пропускания тракта радиометра.

© Куценко В.П.

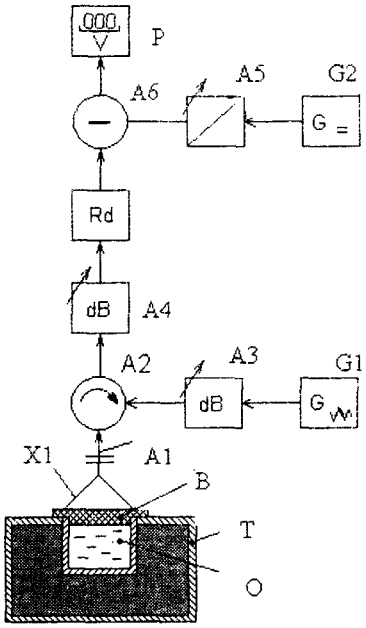


Рис. 1. Функциональная схема измерительной системы для определения биоинформационной составляющей ЭМИ от биологического объекта

Спектральная плотность мощности радиоизлучения при температуре жизнеспособности биологических объектов довольно имела (10^{-19}-10^{-20} Вт/Гц·см^2) и намного меньше уровня собственных шумов усилителей и других элементов радиометра.

В качестве радиометра предлагается использовать модуляционный радиометр с гетеродинным преобразованием СВЧ-колебаний в диапазоне частот 54-78 ГГц (рис. 2). На схеме приняты следующие обозначения: A1 – усилитель промежуточной частоты; A2 – усилитель низкой частоты; G1генератор низкой частоты; G2 – гетеродин; S1 – автоматический переключатель; U1 – смеситель; U2 – квадратичный детектор; U3 – синхронный детектор; Z1 – фильтр нижних частот; Rн – эквивалентная нагрузка.

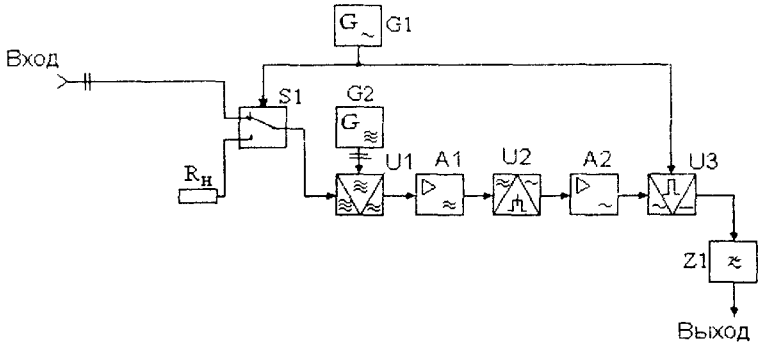


Рис. 2. Функциональная схема модуляционного радиометра Rd с гетеродинным преобразованием

Выделение слабого радиотеплового излучения физического объекта из шумового фона радиоприемного тракта осуществляется с помощью указанной схемы радиометра. При этом мощность сигнала, поступающая на антенну X1 от генератора G1 СВЧ-шума (рис. 1) излучается в направлении объекта О, полностью им поглощается и в радиометр не попадает.

Чувствительность радиометра зависит от уровня его собственных шумов и определяется выражением:

$$\Delta T_{Ш} = \frac{T_{Ш}}{\sqrt{\Delta f \cdot \tau}}, \qquad (3)$$

где $T_{Ш}$ – шумовая температура системы антенна-радиометр; $\Delta T_{Ш}$ – прирост шумовой температуры

под действием энергии принимаемых СВЧ-колебаний; τ – время накопления (усреднения) выходного напряжения радиометра.

Шумовая температура $T_{Ш}$ характеризует суммарную мощность фонового излучения, которое принимается антенной от посторонних объектов, собственных шумов антенны и приемной части радиометра в зависимости от термодинамической температуры и полосы частот:

$$P_{Ш} = k\Delta f T_{Ш}. \quad (4)$$

Таким образом, мощность $P_{Ш}$ определяет паразитный шумовой фон, из которого радиометр выделяет полезный прирост шумовой температуры $\Delta T_{Ш}$.

В модуляционном радиометре благодаря значительному подавлению влияния как высокочастотных, так и низкочастотных шумов, прирост температуры $\Delta T_{Ш}$ составляет 0,05-0,01 К, что позволяет фиксировать довольно слабое радиотепловое излучение на уровне $10^{-21}...10^{-22}$Вт/Гц·см^2.

В радиометре мощность СВЧ-колебаний (2) превращается в пропорциональное постоянное напряжение:

$$U_1 = S_P P_1 = S_P k T_0 \Delta f, \quad (5)$$

где S_P – крутизна преобразования канала радиометра.

Выходное напряжение радиометра U_1 компенсируют напряжением U_0 от источника опорного постоянного напряжения G2. Компенсирующее напряжение U_2 создают, увеличивая коэффициент передачи делителя напряжения A5 до достижения нулевого показания индикатора P. При достижении компенсации:

$$U_1 - U_2 = U_1 - K_1 U_0 = 0, \quad (6)$$

где K_1 – коэффициент передачи делителя напряжения A5.

Потом физический объект в контейнере T в виде АЧТ заменяют на физический объект с коэффициентом излучательной способности, близким к коэффициенту исследуемого биологического объекта. После достижения термодинамического равновесия объекта с термостатом мощность его радиотеплового излучения будет меньшей, чем в АЧТ, поскольку у реальных объектов $\beta < 1$. При этом нарушится условие компенсации в блоке A6 и показание индикатора P возрастет. Однако СВЧ-шум от генератора G1 поступает на антенну X1 и не полностью поглощается объектом O. Коэффициент отражения реального объекта однозначно связан с его излучательной способностью. Если $\beta = 1$, то облучаемое тело, как упоминалось выше, полностью поглощает электромагнитную энергию и его коэффициент отражения $\Gamma = 0$. Поэтому можно считать, что коэффициент отражения реальных физических объектов:

$$\Gamma = 1 - \beta. \quad (7)$$

Отраженный от объекта O СВЧ-шум принимается антенной X1 и через циркулятор на вход радиометра, где суммируется с собственным шумовым радиотепловым излучением физического объекту O.

$$P_2 = k\Delta f T_0 \beta < P_1. \quad (8)$$

Суммарная мощность излучения объекта и отраженного внешнего облучения, которые поступают на радиометр, с учетом того, что они между собой не коррелированы, будет представлять:

$$P_3 = k\Delta f T_0 \beta + (1 - \beta) K_2 P_\Gamma \Delta f, \quad (9)$$

где P_Γ – мощность генератора шума G1; K_2 – коэффициент передачи аттенюатора A3 по мощности.

Увеличением коэффициента передачи K_2 аттенюатора A3 показание индикатора P снова доводят до нулевого. Это означает, что ранее принятое электромагнитное излучение от АЧТ и аналогичное излучение от объекта с некоторым коэффициентом отражения ($\Gamma \neq 0$) и дополнительным облучением с мощностью равны ($P_1 = P_3$):

$$k\Delta f T_0 = k\Delta f T_0 \beta + (1 - \beta) K_1 P_\Gamma \Delta f. \quad (10)$$

Дальше вместо физического (неживого) объекта в контейнер помещают биологический (живой) объект и контейнер устанавливают в термостат. Благодаря метаболичным процессам, которые протекают в живом организме, возникает дополнительное электромагнитное излучение, которое генерируется клетками. Поскольку клеток в организме много, а частоты и амплитуды клеточных токов разные, то результирующее биоинформационное излучение в окружающую среду имеет шумовой характер и по спектру аналогичное равновесному тепловому излучению. Поскольку скорость метаболических процессов в живом организме пропорциональна температуре тканей и органов, то спектральную плотность мощности биоинформационного излучения можно рассматривать в аналитическом виде как:

$$S_{БІ} = \chi k T_0 , \tag{11}$$

где χ – коэффициент биоактивности живого организма.

Поэтому мощность электромагнитного излучения, которая поступает от биологического объекта в антенну:

$$P_4 = P_2 + S_{БІ}\Delta f = kT_0(\beta + \chi)\Delta f . \tag{12}$$

С учетом дополнительного облучения биологического объекта мощность электромагнитного излучения, которое поступает на радиометр:

$$P_5 = kT_0(\beta + \chi)\Delta f + (1 - \beta)K_2 P_\Gamma \Delta f . \tag{13}$$

Поскольку мощность $P_5 > P_3$, то показание индикатора Р снова возрастает относительно нуля. С помощью аттенюатора ослабляют мощность P_5 и достигают восстановления нулевого показания индикатора Р. При этом будет иметь место равенство:

$$K_3\Delta f[kT_0(\beta + \chi) + (1 - \beta)K_2 P_\Gamma] = kT_0\Delta f , \tag{14}$$

где K_3 – коэффициент передачи аттенюатора А4.

Выражение (14) можно представить как:

$$K_3\chi k T_0\Delta f + K_3\Delta f[kT_0\beta + (1 - \beta)K_2 P_\Gamma] = kT_0\Delta f . \tag{15}$$

Если вместо суммы второго и третьего членов равенства (15) подставить значение этой суммы из выражения (10), то получим:

$$K_3\chi k T_0\Delta f + K_3 k T_0\Delta f = kT_0\Delta f \tag{16}$$

или

$$K_3\chi + K_3 = 1 . \tag{17}$$

Вычисляя равенство (17) относительно коэффициента биоактивности, получаем:

$$\chi = \frac{1 - K_3}{K_3} . \tag{18}$$

Зная коэффициент χ объекта можно определить и мощность биоинформационной составляющей электромагнитного излучения от него. Для этого можно воспользоваться формулой (11) и учесть полосу частот Δf радиометра:

$$P_{БІ} = S_{БІ}\Delta f = \chi k T_0\Delta f = \chi P_1 . \tag{19}$$

Мощность излучения АЧТ P_1 легко рассчитать по известной температурой T_0 исследуемого биологического объекта, постоянной Больцмана k и полосе приема радиометра Δf.

Выводы

Из выражения (18) видно, что на значение коэффициента биоактивности не влияют непостоянство чувствительности радиометра S_P, погрешности коэффициента деления K_1 делителя напряжения А5, коэффициента передачи K_2 аттенюатора А3, а также нестабильности мощности P_Γ генератора сверхвысокочастотного шума G1. Благодаря этому повышается точность и чувствительность предложенного способа. Отсутствие требований к наличию биоритмов в живом организме повышает информационную способность этого способа.

С его помощью возможна также оценка уровня биоинформационного излучения, начиная от более простых одноклеточных организмов животного и растительного происхождения, вплоть до высокоразвитых организмов, например, человека.

РЕЗЮМЕ

Розглянуто спосіб оцінки рівня біоінформаційного випромінювання, починаючи від більш простих одноклітинних організмів тваринного і рослинного походження, аж до високорозвинених організмів, наприклад, людини.

SUMMARY

Рассмотрен способ оценки уровня биоинформационного излучения, начиная от более простых одноклеточных организмов животного и растительного происхождения, вплоть до высокоразвитых организмов, например, человека.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Скрипник Ю.О., Манойлов В.П., Яненко О.П. Модуляційні радіометричні пристрої та системи НВЧ-діапазону. – Житомир: ЖІТІ. – 2001. – С. 41-43.
2. Яшин А.А. Информационно-полевая самоорганизация биосистем // Вестник новых медицинских технологий. – Тула. – 2000. – Т. 7, № 1. – С. 30-38.
3. Дубовская И.Г., Житник Н.Е., Миронов А.В. и др. Принципы моделирования схемотехнической реализации низкоинтенсивной КВЧ-диагностической и терапевтической аппаратуры // Вестник новых медицинских технологий. – Тула. – 1996. – Т. 3, № 2. – С. 85-90.
4. Скрипник Ю.А., Яненко А.Ф., Манойлов В.П., Куценко В.П., Гимпилевич Ю.Б. Микроволновая радиометрия физических и биологических объектов.Житомир: „Волынь", 2003.408 с.
5. Чукова Ю.П. Механизмы биологических эффектов электромагнитных полей // Биомедицинские технологии и радиоэлектроника. – № 11. – 2001. – С. 32-41.
6. Петросян В.И., Житенева Э.А., Гуляев Ю.В. и др. Физика взаимодействия миллиметровых волн с объектами различной природы // Биомедицинская радиоэлектроника. Радиотехника.1996.№ 9. – С. 20-31.
7. Патент № 66419 (Украина), G01N22/00, G01J5/00. Способ определения биоинформационной составляющей электромагнитного излучения от биологических обьектов / Головко Д.Б., Скрипник Ю.А., Яненко А.Ф., Куценко В.П. № 2002108581; Заявл. 29.10 2002; Опубл. 17.07.2006; Бюл. № 7.

Надійшла до редакції 7.09.2007 р.

УДК 621.317

УСТРОЙСТВА ОБРАБОТКИ СИГНАЛОВ НА ПРИНЦИПАХ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

А.Н.Крыщенко, М.В.Плыс, Т.В.Белик

Введение

Основным структурным элементом любой информационно-измерительной системы являются вычислительные средства (ВС) обработки сигналов. Переход к цифровым методам обработки сигналов позволил существенно улучшить основные технические характеристики ВС (надежность, технологичность и др.). Однако такой переход сопровождался и определенным рядом недостатков. Известно, что аналоговая обработка (с использованием аналоговых ВС) позволяет на несколько порядков улучшить массогабаритные, энергозатратные и скоростные характеристики аппаратных реализаций ВС, повысить их производительность. Достижение их как один из подходов решения проблемы может быть реализовано использованием принципов функциональной электроники, основной из которых «...переход от микроминиатюризации микросхем к миниатюризации устройств» [1, 2].

Целью настоящей работы является обзор направлений развития функциональной электроники (ФЭ), анализ существующих физических явлений потенциально пригодных для создания устройств обработки радиосигналов на принципах ФЭ, рассмотрение структур, назначения, достоинств и недостатков, а также, возможностей использования таких устройств не только в ВС, но и в смежных областях науки и техники.

1. Направления развития функциональной электроники

Основной отличительной особенностью современной электроники твердого тела является высокий уровень степени интеграции как за счет увеличения числа элементов в кристалле, так и за счет усложнения выполняемых функций. Путем микроминиатюризации появились сверхбольшие интегральные схемы (СБИС), состоящие из десятков и сотен тысяч транзисторов, с определенной архитектурой, схемотехникой и системотехникой. Уровень микроминиатюризации (степень интеграции) продолжает непрерывно расти, хотя темпы роста в последнее время замедляются в связи с приближением СБИС к предельным возможностям по размерам элементов, рассеиваемой мощности, скорости передачи сигнала и т. п. Еще недавно минимальные топологические размеры для интегральных схем массового производства составляли около 5 мкм. Сейчас эта величина уменьшилась до 1 мкм. Сегодня ставится вопрос об освоении субмикронных размеров, однако при этом возникает целый ряд серьезных проблем, связанных с физическими ограничениями, вызванными возникновением туннельных явлений. Прогнозируется, что пределом уменьшения размеров элемента топологии (ширина линий, зазоров между ними и т. д.) является величина 0,2 мкм. В то же время есть все основания полагать, что еще до достижения физических пределов интеграции возникнут весьма существенные технологические ограничения, вызванные в первую очередь влиянием посторонних микрочастиц в окружающей среде, вследствие чего существенно снижается воспроизводимость технологических процессов (процент выхода годных микросхем). Другим серьезным ограничением являются трудности, связанные с переходом к субмикронным линиям при нанесении рисунка схемы (трудности литографии). Учитывая, что длина волны видимого света (0,4 – 0,7 мкм) становится соизмеримой с толщиной проводников схемы, специалисты – разработчики современных СБИС вынуждены переходить к рентгено-, электронно- и даже протонолитографии. Кроме того, при переходе к субмикронной технологии существенно возрастает влияние процессов ионного легирования и температурных изменений [3].

Одним из существенных ограничений традиционной схемотехнической микроминиатюризации является *проблема межсоединений*, вызванная существенным возрастанием доли кристалла, занимаемой соединениями между схемотехническими дискретными элементами (транзисторами, диодами и т. д.). Так, например, при переходе к 12-уровневой разводке при 20000 вентилей на кристалле разводка будет занимать около 50% площади кристалла, что резко снижает коэффициент полезного использования площади подложки. С другой стороны, расчеты показывают, что толщина металлических и особенно диэлектрических слоев не должна быть меньше 0,05 мкм, что обусловлено проблемой рабочих и пробивных напряжений. В этом случае проблема дефектов еще более обостряется, резко снижая надежность изделий.

Большие надежды в решении указанных проблем микроэлектроники связывают в последние годы с твердотельной электроникой, в которой ведутся поисковые работы по использованию новых физических принципов и эффектов с целью создания принципиально новых электронных устройств, отличительной особенностью которых является использование несхемотехнических принципов построения [4].

© Крыщенко А.Н., Плыс М.В., Белик Т.В.

В этом случае функции схемотехники выполняют непосредственно те или иные физические процессы, характерной чертой которых является наличие и использование для хранения и обработки информации, так называемых динамических неоднородностей в однородном объеме твердого тела. Физическая интеграция, использующая динамические неоднородности для выполнения определенных функций, приводит к исключению схемотехники или значительному снижению ее удельного веса. Данное направление в твердотельной электронике называют функциональной микроэлектроникой, а устройства, реализующие ее принципы, – устройствами функциональной электроники (УФЭ).

Необходимо подчеркнуть, что появление функциональной электроники никоим образом не ставит под угрозу развитие традиционной схемотехнической электроники, а лишь дополняет, расширяет возможности и перспективы современной микроэлектроники. Это единство и взаимное дополнение схемотехнической и функциональной микроэлектроники наглядно представлено на рис. 1.



Рис. 1. Основные направления развития микроэлектроники

Рассмотрим кратко основные направления современной функциональной микроэлектроники с позиций функциональной общности УФЭ, в основе которых лежат различные физические явления.

Как и любые электронные приборы, УФЭ выполняет три основные функции: ввод информации, обработку сигналов, вывод информации. Однако основной отличительной особенностью УФЭ является функция, выполняемая активной средой, в которой накапливается подвергаемая обработке информация, в то время как любой прибор традиционной схемотехнической электроники сам по себе накапливать информацию не может. Эту функцию выполняет устройство, включающее в себя множество функциональных элементов.

Необходимость обработки больших объемов информации привела к созданию интегральных схем, содержащих миллионы транзисторов на одном кристалле.

Активная среда УФЭ обладает двумя характерными отличительными признаками: в ней может храниться и обрабатываться большой объем информации и управление ею обеспечивает изменение алгоритма обработки сигнала. Следовательно, УФЭ по своим отличительным признакам близко к процессору ЭВМ, реализуемому в виде специализированной большой интегральной схемы (СпБИС) на традиционных транзисторных структурах, однако в УФЭ процесс обработки сигнала происходит в среде, однородной в смысле ее конструкторско-технологической реализации. Таким образом, УФЭ представляет собой процессор, выполненный на отличных от традиционных процессоров принципах, и заменить его не могут все возможные реализации процессоров на СБИС. УФЭ успешно осуществляют обработку аналоговых сигналов, не нуждаясь в предварительном переводе сигнала в цифровой код, при этом обработка совершается в реальном масштабе времени. Прекрасные массогабаритные и энергетические характеристики наряду с высокой надежностью и быстродействием делают процессоры УФЭ весьма перспективными приборами, способными обеспечить решение задач по созданию аппаратуры нового поколения, использующей новые физические принципы и явления. Согласно приведенной классификации (рис. 1), рассмотрим некоторые реализации структур процессоров функциональной электроники (ПФЭ).

1.1. Процессоры на приборах с зарядовой связью [5]

Активной средой приборов с зарядовой связью (ПЗС) является полупроводниковая пластина с расположенной на ней системой электродов (рис. 2). С помощью устройства управления под каждый электрод может быть введен объемный заряд, образованный сгустками носителей заряда (например, дырками). Под действием приложенных электрических потенциалов, изменяющихся определенным образом, сгустки заряда, введенные под электроды, последовательно перемещаются. Наличие или отсутствие заряда соответствует 1 или 0 информации.

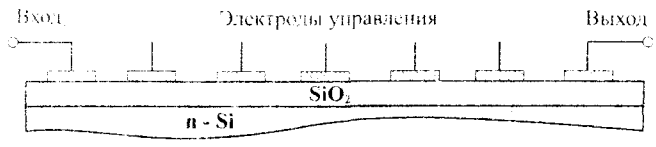


Рис. 2. Структура ПЗС – процессора

Ввод информации в ПЗС – процессор осуществляется активным элементом (транзистором), в котором инжектируется сгусток заряда в подзатворную область, связанную с периодической системой электродов, реализующих активную среду процессора. Вывод сигнала из активной среды осуществляется аналогичным элементом, причем проводимость элемента определяется приходом неравновесных носителей из активной среды ПЗС. Рассмотренный ПЗС – процессор выполняет функции: *регистра сдвига, линии задержки, устройства памяти и др.* Наиболее интересной областью применения подобного процессора является преобразование оптического сигнала в электрический при одновременном осуществлении телевизионной развертки изображения по строкам и кадрам.

1.2. Процессоры на цилиндрических магнитных доменах [6]

Весьма перспективными и нашедшими уже в технике применение являются представители другого раздела функциональной электроники (магнитоэлектроники) – процессоры на цилиндрических магнитных доменах (ЦМД), структура которого представлена на рис. 3. Носителем информации в них является домен, представляющий собой цилиндрическую область в тонкой ферритовой пленке (отсюда и название ЦМД).

Намагниченность ЦМД противоположна намагниченности основного объема пленки. Пленка обладает магнитной анизотропией (осью легкого намагничивания, перпендикулярной поверхности пленки) и располагается в постоянном магнитном поле, ориентированном вдоль оси анизотропии. Обычно толщина пленки и диаметр ЦМД имеют величину порядка 1 мкм. На поверхность пленки наносятся ферромагнитные аппликации. Для перемещения ЦМД в пространстве производится перемагничивание аппликации вращающимся магнитным полем, вектор поляризации которого лежит в плоскости пленки и вращается вокруг оси, перпендикулярной пленке, с частотой до 10 МГц. Каждый период вращения обеспечивает перемещение ЦМД па один период аппликаций. В подобном процессоре активной средой является ферритовая пленка с аппликациями в сочетании со статическим нормальным и вращающимся касательным полем. Ввод информации обеспечивается генератором ЦМД, в котором используется импульсное перемагничивание ограниченной области пленки. Для вывода информации служат, например, элементы с магниторезистивной пленкой, электрическое сопротивление которой зависит от наличия ЦМД под элементом.

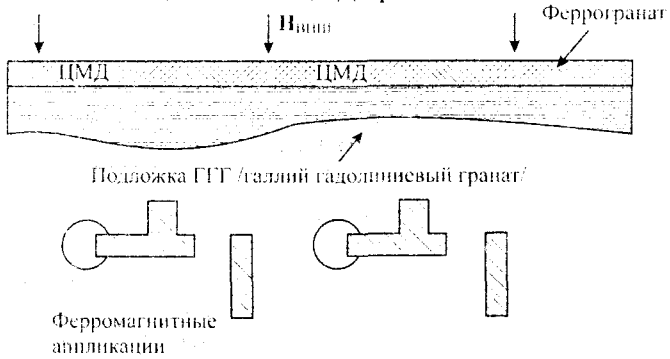


Рис. 3. Структура ЦМД – процессора

Необходимо подчеркнуть, что описанная выше структура процессора на ЦМД полностью аналогична структуре процессоров на ПЗС в отношении процессов переноса сигнала, записи и хранения информации, хотя процессоры используют совершенно разные физические явления.

Возможен также оптический вывод информации, для чего используется вращение плоскости поляризации света, проходящего через пленку, поскольку в основной массе пленки и в ЦМД плоскость поляризации вращается в разные стороны. Перспективно использование системы ЦМД как оптической голограммы, управляемой электрическими сигналами.

Основной областью применения процессоров на ЦМД в настоящее время является использование их в качестве запоминающих устройств (ЗУ). ЗУ на ЦМД наиболее перспективны для применения в энергонезависимых системах памяти среднего объема (10^6 – 10^8 бит). Основными достоинствами таких ЗУ являются: возможность сохранения информации при отключении питания, перепрограммируемость, отсутствие механических частей, высокая радиационная стойкость, возможность исполнения в виде большой интегральной схемы.

ЗУ на ЦМД могут использоваться в качестве внешней памяти квазиэлектронных АТС, в автоответчиках, в телефонах и т. п. Находят они применение также в аппаратуре передачи и обработки информации. Дальнейший прогресс в использовании устройств на ЦМД связан с совершенствованием процессоров на основе доменосодержащих материалов, обеспечивающих логическую обработку информации.

На основе материалов с ЦМД – структурой ведутся разработки магнитооптических ЗУ и управляемых транспарантов, представляющих собой специальный тип дисплея и служащих для преобразования записываемой информации в двухмерный оптический сигнал. Такие дисплеи перспективны для использования в портативной вычислительной технике.

1.3. Процессоры на поверхностных акустических волнах (ПАВ) [6, 7]

В настоящее время, довольно перспективными считаются процессоры на ПАВ (рис. 4), использующие волны механической деформации твердого тела, распространяющиеся вдоль его поверхности. Благодаря сравнительно низкой скорости распространения волны обеспечивается существенная задержка сигнала во времени или динамическая запись сигнала значительного объема. Быстрому внедрению процессоров на ПАВ, безусловно, способствовало то обстоятельство, что технология их производства во многом аналогична технологии производства полупроводниковых микросхем, которая главным образом определяется последовательным нанесением (путем напыления) различных материалов на основание (подложку).

Активной средой в процессорах на ПАВ является приповерхностный слой кристалла, вдоль которого распространяется акустическая волна. Для связи среды с входом и выходом, представляющими собой цепи с электрическими сигналами, используются пьезоэлектрические элементы, в которых акустическая деформация вызывается электрическим полем входных и выходных электродов специальной конфигурации.

Необходимо отметить, что эффективность обработки сигналов на ПАВ увеличивается с ростом несущей частоты сигнала. Однако реализация процессоров на ПАВ на частотах свыше 1 ГГц сдерживается серьезными технологическими ограничениями, связанными с субмикронными расстояниями между элементами гребенчатой структуры при размерах самой структуры порядка 1 мм.

Наиболее освоены в настоящее время линейные устройства ПАВ. В основе их функционирования лежат

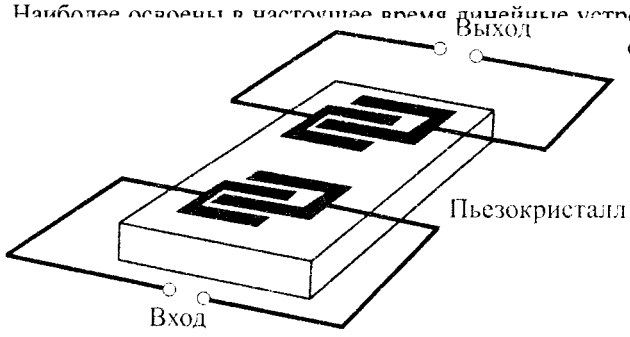


Рис. 4. Структура ПАВ – процессора

ейном приближении. В таких устройствах в качестве рабочего тела обычно используется один материал и одно или два из его свойств (электрических или упругих). К числу таких устройств относятся уже освоенные промышленностью линии задержки, резонаторы, фильтры, накопители информации. По принципу применения они являются аналогами обычных радиотехнических узлов, но реализованных на новых физических принципах. Внедрение подобных устройств функциональной электроники оценивается как один из эффективных способов микроминиатюризации и улучшения технических характеристик радиоэлектронной аппаратуры (уменьшаются массогабаритные параметры, энергопотребление, повышается точность обработки сигналов, улучшается отношение сигнал/шум на выходе приемных устройств и т. п.).

Большие возможности процессоров на ПАВ связываются с нелинейной обработкой сигналов [7]. Нелинейные эффекты в пьезоэлектрике позволяют осуществить перемножение двух сигналов с выделением результирующей компоненты, которая представляет собой свертку двух сигналов в реальном масштабе времени и служит основой корреляционной обработки, оптимальной фильтрации, Фурье-анализа и ряда других видов обработки аналоговых сигналов.

Очень важно, что использование нелинейных устройств на ПАВ приводит, как правило, к принципиальному изменению структуры аппаратуры. Например, акустические процессоры позволяют отказаться от необходимости аппаратной реализации квантования спектра исследуемых сигналов, последующей их задержки, осуществления свертки отдельных частей сигналов и т. д. Процессор на ПАВ построен так, что осуществляет по заданному закону весь процесс корреляционной обработки сигналов в целом.

1.4. Процессоры на спиновых волнах (СВ – процессоры) [8]

Спиновая волна или магнитостатическая волна представляет собой волновой процесс ориентации спиновых магнитных моментов электронов, ответственных за ферромагнитные свойства вещества. Спиновый процессор (рис. 5) состоит из тонкой ферромагнитной пленки, нанесенной на неферромагнитную подложку.

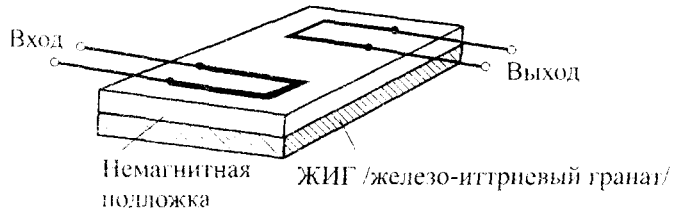


Рис. 5. Структура СВ – процессора

Пленка находится в статическом магнитном поле, приводящем вещество в состояние магнитного насыщения, благодаря чему обеспечивается исходная ориентация спинов. Магнитное поле входного сигнала (как правило, СВЧ – сигнала) вызывает колебания спинов, в результате чего происходит возбуждение СВ. Путем изменения напряженности постоянного магнитного поля возможно управление дисперсией СВ. Фазовая и групповая скорости СВ могут существенно отличаться, что позволяет обеспечить большую задержку или накопление сигнала в активной среде. К большому преимуществу процессоров на спиновых волнах относится простота выполнения конструкции – субмикронной точности не требуется. Обычно это отрезок микрополосковой линии. Функционально процессоры на СВ и на ПАВ равноценны, однако спиновые волны могут быть использованы на более высоких частотах (2 – 20 ГГц).

Простейшими устройствами на СВ являются линии задержки, трансверсальные, полосовые и резонансные фильтры, ответвители, фильтры сжатия линейно-частотно-модулированных (ЛЧМ) сигналов, частотно-избирательные шумоподавители.

В настоящее время существуют технические решения генераторов сдвига частоты радиорелейных линий связи, фазовращателей. СВЧ – генераторы на СВ с управляемой перестройкой частоты позволяют создавать СВЧ – устройства, обрабатывающие сигналы в реальном масштабе времени. К дополнительным преимуществам устройств на СВ относится возможность обработки сигналов непосредственно в СВЧ – диапазоне. Полосовые фильтры на СВ могут найти применение в приемниках непосредственного телевизионного вещания через ИСЗ, в селекторах каналов приемников многоканальных систем связи. Предполагается использование процессоров на СВ в смесителях, схемах синхронизации, приемниках шумоподобных сигналов, Фурье – преобразователях, схемах стробирования, приемниках-повторителях спутниковых систем связи и др. В задачах нелинейной обработки используется нелинейность намагниченности феррита по отношению к СВЧ магнитному полю, связанному с СВ. Для решения некоторых задач спектрального анализа и ввода информации в оптические системы обработки сигналов используется эффект рассеяния света на спиновых волнах (магнитооптический эффект в феррите).

1.5. Процессоры на эффекте спинового или электроакустического эха [9]

Большие перспективы создания устройств оптимальной обработки радиочастотных сигналов связаны с изучением таких физических явлений, как ядерное и электронное спиновое эхо. С помощью подобных устройств можно осуществлять задержку радиосигналов в диапазоне частот 100 – 600 МГц, сжатие ЧМ – сигналов, согласованную полосовую фильтрацию, корреляцию и автокорреляцию. Согласованные фильтры на основе спинового эха используются в модемах широкополосных систем связи с шумоподобными сигналами, которые обеспечивают малое время вхождения в синхронизм (сотни миллисекунд) при базе сигналов в десятки тысяч бит. Эффект спинового эха заключается в возможности записи сигнала в объеме твердого тела путем воздействия магнитного поля, несущего сигнал, на систему спинов электронов или ядер вещества. По истечении некоторого времени $\tau_з$ (задержка сигнала) записанный сигнал может быть считан. Для этого к объему твердого тела через время $\tau_з/2$ после подачи сигнала прикладывается считывающий импульс. Физическая природа эха заключается в том, что после приложения и снятия сигнала отклик системы исчезает вследствие нарушения когерентности различных спектральных компонент колебании системы. Воздействие считывающего импульса благодаря нелинейности системы возбуждает компоненты колебаний с обратным изменением фазы, что приводит к восстановлению когерентности колебаний через время $\tau_з$ (возникает эхо).

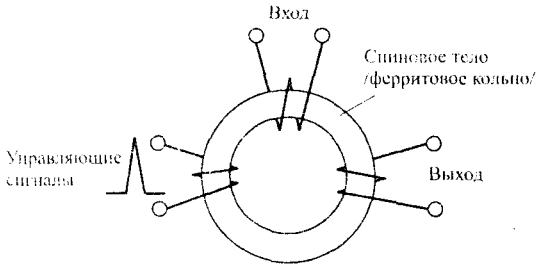


Рис. 6. Структура ЯМР – процессора

Для практической реализации эхо – процессоров используются явления спинового эха на системе ядерных спинов (ядерное эхо) или акустических колебаний в пьезоэлектрике (фононное эхо).

Носителем информации в этих случаях служат колебания спинов ядер или атомов решетки. Активной средой, таким образом, является объем твердого тела (рис. 6). Ввод и вывод информации осуществляется индукторами магнитного или электрического поля соответственно. На основе эха уже сегодня ведутся разработки систем памяти и спектральной обработки сигналов.

Представляет интерес явление длительного хранения сигнала в пьезоэлектрической активной среде (фононный процессор), связанное с образованием заряженных дефектов кристаллической решетки, возникающих под действием интенсивной волны сигнала (рис. 7). Система дефектов служит своеобразной акустической голограммой, восстанавливающей волну сигнала после воздействия на нее считывающей волны. В литературе обсуждаются также эффекты эха в сверхпроводнике, в котором носителем информации служат магнитные вихри.

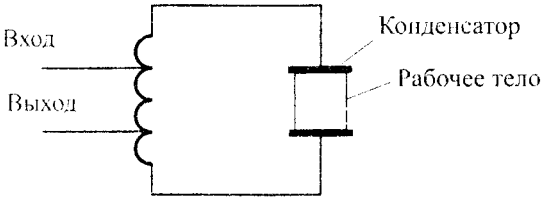


Рис. 7. Структура фононного процессора

Обзор возможных реализаций структур процессоров обработки сигналов, выполненных на основе принципов функциональной электроники (ПАВ, ПЗС, ЦМД, СВ), и анализ существующих технических возможностей их реализации показывает, что процессоры на основе использования явления эха отличаются более высоким (на два порядка) уровнем интеграции. Например, уровень интеграции, достигаемый в спиновом устройстве, близок к предельному и определяется межатомным расстоянием. Это на три порядка (в 1000 раз!) выше минимального топологического размера современных СпБИС и на два порядка выше предельно ожидаемого значения указанного параметра. Технология изготовления спиновых устройств достаточно проста, поскольку формирование статических неоднородностей (доменных границ) обеспечивается за счет процесса кристаллизации порошкообразных окислов при их спекании. В этом случае, так как динамическая неоднородность не перемешается в объеме кристалла, требования к пространственной однородности синтезируемых материалов и степени очистки исходного сырья значительно снижаются. Кроме того, отпадает и необходимость точного сопряжения форм геометрических элементов. Это выгодно отличает спиновые устройства от других устройств, производство которых основано на применении сверхчистых веществ и микротопологии. Указанные особенности существенно улучшают воспроизводимость технологических процессов, повышают надежность и увеличивают процент выхода годных изделий. Все это создает реальную основу для будущей организации массового выпуска эхо – процессоров.

Однако говоря о замечательных свойствах эхо – процессоров, нельзя не отметить, что в настоящее время они еще в основном не вышли из стен лабораторий и находятся на стадии интенсивного исследования. Основным препятствием на пути внедрения эхо – процессоров является в настоящее время отсутствие систематизированных публикаций по особенностям построения и возможностям их использования в науке и технике. Далее, предлагается, насколько возможно, устранить этот недостаток.

2. Эхо процессоры

Рассмотрим возможность реализации эхо – процессора (ЭП) на примере использования ЯМР. В общем виде для получения сигнала спинового эха образец, содержащий магнитные частицы с полуцелым спином (магнитным моментом ядер), помещают в постоянное магнитное поле и на него подают два радиочастотных импульса на частоте магнитного резонанса. При выполнении условий, налагаемых на импульсную последовательность, и спустя время, равное удвоенному временному интервалу между первым и вторым импульсами, возникает сигнал спинового эха (эхо – процессор, реализующий функции задержки радиосигналов). Первый импульс является входным (информационным) сигналом, второй – управляющим, регулирующим электрическим путем необходимую величину задержки в больших пределах, а эхо – задержанным входным сигналом. Практическая ценность использования спинового эха состоит также в том, что временное положение и форма эхо-сигнала однозначно связаны со спектром входных сигналов и их временной расстановкой, а изменение функций устройства можно легко получить путем изменения частоты, фазы, временного положения управляющих импульсов. Таким образом, эхо – процессор является многофункциональным квантовым устройством обработки сигналов.

Рассмотрим процесс образования сигнала ядерного эха. Пусть образец (рабочее тело) содержит в себе определенное количество ядерных магнитных моментов с гиромагнитным отношением γ. Если этот образец находится во внешнем магнитном поле $\overrightarrow{H_0}$ то ядерные магнитные моменты прецессируют вокруг направления $\overrightarrow{H_0}$ с частотой $\omega_0 = \gamma \overrightarrow{H_0}$. Если на образец подать два радиочастотных импульса с частотой заполнения ω_0, задержанных один относительно другого на время τ_{12}, то в момент времени $2\tau_{12}$ возникает резко выраженный отклик ядерной системы в виде радиочастотного импульса. Это и будет сигналом ядерного эха (рис.8).

Более подробно на условиях формирования эха остановимся ниже, здесь же отметим, что в соответствии с рис. 8 сигнал эха может быть представлен как задержанный на время $2\tau_{12}$ первый радиочастотный сигнал. Причем время задержки определяется только временем подачи второго импульса и по-

этому может регулироваться произвольным образом электрическим путем. Необходимо подчеркнуть, что стабильность задержки не зависит от внешних условий и определяется стабильностью включения второго (считывающего) импульса по отношению к первому, что легко практически реализовать.

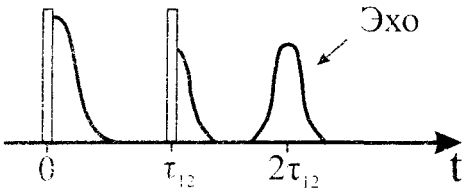


Рис. 8. Схема образования сигнала двухимпульсного эха

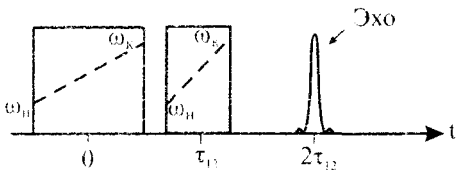


Рис. 9. Схема двухимпульсного метода сжатия ЛЧМ-сигналов

Рассмотрим процесс сжатия линейно-частотно-модулированных (ЛЧМ) сигналов с помощью явления спинового эха (рис. 9).

Обычно в радиотехнических устройствах сжатие осуществляется следующим образом: ЛЧМ – сигнал с частотой заполнения $\omega(t) = \omega_0 + At$ попадает на вход линии задержки, обладающей дисперсией $\tau(\omega) = \tau(\omega_0)+(\omega-\omega_0)A^{-1}$. На выходе устройства формируется сжатый радиочастотный импульс с длительностью $\sim 2\pi(A\tau_и)^{-1}$, где $\tau_и$ – длительность исходного ЛЧМ сигнала. Метод спинового эха легко позволяет воспроизвести линию задержки с подобным законом дисперсии. Для этого в качестве второго радиочастотного импульса достаточно подать сигнал с частотой заполнения $\omega(t)=\omega_0+2A(t-\tau_{12})$.

Для более наглядного представления процесса сжатия каждый из импульсов, подаваемых на рабочее тело, разобьем на малые отрезки, частоту заполнения внутри которых можно считать постоянной. Тогда, полагая, что взаимодействуют между собой только те отрезки из первого и второго импульсов, которые имеют одинаковые частоты, на выходе получим узкий δ-образный сигнал эха, поскольку сигналы эха каждой пары формируются в одно и то же время.

Отметим, что с помощью явления эха можно осуществить сжатие (точнее, согласованную фильтрацию) сигналов с гораздо более сложной структурой частотного спектра.

2.1. Основы теории ядерного спинового эха (ЯСЭ) [10, 11]

Воспользуемся векторной моделью намагниченности. Пусть возбуждающее поле создается последовательностью из двух радиоимпульсов, разделенных интервалами времени t_{12}. В этом случае (рис. 10) вектор намагниченности $\overline{m}(t)$ изменяет свой угол прецессии Θ относительно оси Z и величину проекции на плоскость XY, причем, $\Theta = \gamma H \tau$, где γ – гиромагнитное отношение ядра (отношение механического момента к магнитному); H – амплитуда напряженности магнитного поля импульса; τ – длительность импульса.

В результате первый импульс повернет вектор намагниченности в плоскости XY, а второй осуществит обращение этого вектора. Время существования макроскопической намагниченности всего образца в поперечной плоскости XY при наличии неоднородности поляризующего поля $\overrightarrow{H_0}$, которое определяет частоту прецессии вектора, называемой ларморовой прецессией, равно $T^*_2 = \dfrac{2\pi}{\Delta\omega_0}$, где $\omega_0=\gamma H_0$; $\Delta\omega_0$ – ширина линии неоднородности ЯМР (полоса пропускания эхо – процессора).

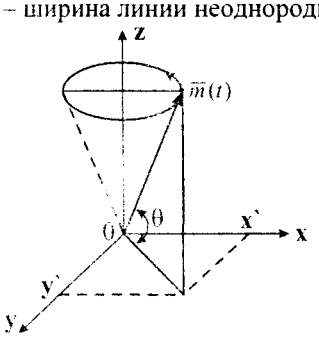


Рис. 10. Векторная модель намагниченности

В пределах времени так называемой поперечной спин-спиновой релаксации $T_2>>T^*_2$ поперечные составляющие вектора намагниченности сохраняют амплитудные и фазовые соотношения возбуждающего импульса. Обращение направления поперечных составляющих после воздействия второго импульса приводит к синфазному сложению в момент времени $t=2t_{12}$, т. е. появлению эхо-сигнала, который может быть зарегистрирован по величине изменения магнитной индукции вещества. За счет внутренних спин – решетчатых взаимодействий за время продольной релаксации $T_1>T_2$ вектор намагниченности возвращается в первоначальное положение и процесс возбуждения заканчивается. Таким образом, за счет существования эффекта ЯСЭ время поперечной релаксации T_2 определяет время памяти спинового эхо – процессора, а время продольной релаксации T_1 – время его восстановления.

В случае для малосигнального приближения и без учета влияния релаксации спектр эхо-сигналов можно представить в виде $\dot{S}_{вых} = kg(\omega)\dot{S}^*_{вх}(\omega)\cdot\dot{S}^2_{вх}(\omega)$, где $\dot{S}_{вх}$ – спектр внешних сигналов; $S^*_{вх}$ – комплексно-сопряженный спектр внешних сигналов; $g(\omega)$ – функция, описывающая форму линии поглощения вещества; k – коэффициент пропорциональности. С другой стороны, в общем случае суммарный спектр внешних (воздействующих) сигналов можно записать в виде

$\dot{S}_{вх}(\omega) = \sum_{i=1}^{L} S_i \exp(-j\omega t_{1i})$, где S_i – спектр отдельных составляющих; t_{1i} – сдвиг во времени i-го импульса относительно первого, принятого за начало отсчета.

Подставив второе выражение в первое, получим окончательно суммарный спектр эхо – отклика:

$$\dot{S}_{вх}(\omega) = kg(\omega)\{\sum_{i=1}^{L} |\dot{S}_i|^2 S_i \exp[-j\omega t_{1i}] + 2\sum_{i=1}^{L-1}\sum_{n=i+1}^{L} |\dot{S}_i|^2 \cdot \dot{S}_n \exp[-j\omega t_{1n}] +$$

$$+ \sum_{i=1}^{L-1}\sum_{n=i+1}^{L} \dot{S}_i^* \dot{S}_n^2 \exp[-j\omega(2t_{1n} - t_{1i})] + 2\sum_{i=1}^{L-2}\sum_{n=L+1m=n+1}^{L-1}\sum^{L} \dot{S}_i^* \dot{S}_n \dot{S}_m \exp[-j\omega(t_{1m} + t_{1n} - t_{1i})]\}$$

Анализируя приведенное выражение, можно сделать вывод, что два первых слагаемых отображают прямое прохождение внешних сигналов с весовым коэффициентом $|\dot{S}_i|^2$.

Наибольший интерес представляют два последующих слагаемых, которые описывают спектры эха, причем формирование эха происходит либо по двухимпульсному (третья сумма), либо по трехимпульсному методу (четвертая сумма). Отметим, что эхо, образуемое по двухимпульсному методу, представляет собой взаимокорреляционную функцию первого сигнала со сверткой второго, а по трехимпульсному методу – корреляционную функцию трех сигналов, причем при всех корреляционных взаимодействиях возбуждающих импульсов один из них участвует в комплексно-сопряженном виде.

Таким образом, краткий теоретический анализ явления ядерного спинового эха позволяет сделать очень важный вывод о том, что возможность комбинации структур возбуждающих импульсов и изменения последовательности возбуждения делает эхо – процессор многофункциональным устройством, ядром которого является ферромагнитный образец – спиновое тело (СТ), определяющее его основные технические характеристики.

2.2.1. Эквивалентная схема СТ

Одной из характерных особенностей эхо – процессоров, как и вообще устройств функциональной электроники, является интеграция физических процессов и многофункциональность их элементов. Для понимания физического процесса ЯСЭ и функций отдельных его составляющих при использовании в процессоре, воспользуемся известным в радиоэлектронике методом анализа на основе эквивалентной схемы. Синтезируем эквивалентную схему, используя физические аналоги протекающих процессов и функциональных взаимодействий. Рассмотрим кратко принцип работы спинового тела на примере одного ядра в образце, используя трехимпульсный метод. Как видно из рис. 11, пункт 1, магнитный момент μ рассматриваемого ядра ориентирован вдоль поля $\vec{B}$, совпадающего с направлением оси Z. Запись информации осуществляется управляющим магнитным полем $H_y = H_{макс}\cos(\omega t)$, направленным перпендикулярно полю $\vec{B}$ вдоль оси Y.

Под действием поля H_y вектор магнитного момента ядра начинает прецессировать вокруг оси Y с частотой ω, определяемой величиной причинного поля H_y, отклоняясь от оси Z в соответствии с законом $\Delta\varphi = \omega t$.

Спин (магнитный момент ядра), выведенный из положения, параллельного полю $\vec{B}$, одновременно начинает взаимодействовать с этим полем и вовлекаться в прецессию с ларморовой частотой $\omega_л$ вокруг оси Z (вектор спина описывает коническую поверхность с вершиной в центре ядра). В случае если эта частота совпадает с частотой управляющего поля ω, то приращение отклонения спина от оси Z сохраняет знак в течение всего времени воздействия управляющего поля. Если на спин действует несколько синусоидальных управляющих сигналов одновременно, то величина его результирующего отклонения определяется только энергией компонента сигнала с частотой, равной ларморовой.

Однако на практике поле в образце неоднородно. Неоднородность наблюдается у любого ферромагнитного образца, имеющего доменную структуру. Ядра образца, расположенные в точках с различным значением магнитного поля, имеют различные ларморовые частоты. Поэтому совокупность всех ядер образца характеризуется некоторым спектром ларморовых частот с полосой (полоса возбуждения спинового тела). До воздействия на образец импульсов управляющего поля магнитные моменты всех ядер образца направлены вдоль внутреннего поля $\vec{B}$, образуя результирующий вектор намагниченности $\boldsymbol{M}_р$. Для однозначности предположим, что спектр первого импульса H_y равномерен в полосе возбуждения СТ, тогда все векторы, составляющие $\boldsymbol{M}_р$, по окончании воздействия управляющего поля отклонятся на одинаковый угол от оси Z и, взаимодействуя с полем $\boldsymbol{B}$, будут прецессировать вокруг его направления, описывая конус. Угол при вершине конуса определяется величиной энергии спектральных составляющих первого импульса H_y. Выберем энергию его такой, чтобы спины отклонялись им от оси на 90° и по окончании его воздействия прецессировали в плоскости XY. Частоты прецессии ядер различны и рас-

пределены в некотором диапазоне – полосе пропускания. Следствие этого – явление так называемого рассыпания векторов в плоскости XY. Поскольку число ядер в образце велико и значения магнитного поля в нем образуют практически непрерывный ряд, то полученный веер векторов будет непрерывным.

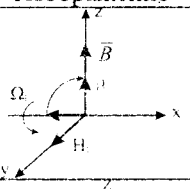
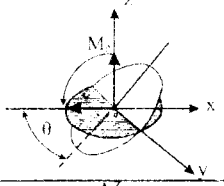
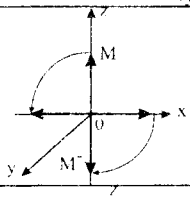
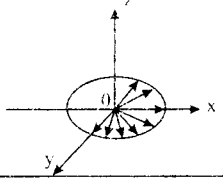
Функция	Изображение
1. Расположение направления вектора магнитного поля $\vec{B}$ и магнитного момента μ_i	
2. Поворот плоскости ориентации спинов импульсом управляющего поля	
3. Запоминание сигнала в образце	
4. Наведение эхо-сигнала в образце	

Рис. 11. Векторная модель спинового тела

Через $\tau \geq \frac{2\pi}{\Delta\omega_i}$ каждому вектору в правой полуплоскости с набегом за это время фазы φ_i соответствует вектор в левой полуплоскости с набегом фазы $\varphi_i + \pi$. Скорости прецессии векторов в этой произвольно выбранной паре таковы, что один обгоняет другой на угол $\Delta\varphi=\pi$ за время τ.

После импульса управляющего поля (первичного сигнала – ПС) поступает второй импульс, именуемый в дальнейшем копией сигнала (КС), поле которого направлено также вдоль оси Y, а спектр, как и у ПС, однороден в полосе $\Delta F_{\text{сг}}$. В результате действия КС каждый спин поворачивается вокруг направления действия поля H_y на один и тот же угол, и следовательно, частота прецессии всех ядер в управляющем поле $\boldsymbol{H}_y$ одинакова.

Изменение положения спинов под действием КС проще представить, рассмотрев их прецессии в полях $\boldsymbol{H}_y$, и $\boldsymbol{B}$ поочередно: сначала вся плоскость векторов поворачивается вокруг оси Y на некоторый угол θ, определяемый энергией КС (рис. 11, пункт 2), затем каждый из векторов прецессирует вокруг оси в поле $\boldsymbol{B}$, сохраняя то значение угла, которое получено им после воздействия КС. При этом векторы, находившиеся к моменту подачи КС в правой полуплоскости, дадут положительную проекцию на ось Z (наведут в образце вектор намагниченности $\boldsymbol{M}^+$), векторы левой полуплоскости наведут вектор $\boldsymbol{M}^-$. В силу симметрии векторы $\boldsymbol{M}^+$ и $\boldsymbol{M}^-$ равны и, результирующая намагниченность образца равна нулю. Векторы $\boldsymbol{M}^+$ и $\boldsymbol{M}^-$ с момента их образования заключаются в образце, поскольку они направлены вдоль внутреннего поля $\boldsymbol{B}$ и не взаимодействуют с ним. Заметим, что время памяти образца ограничено различными релаксациями, из-за которых величины этих векторов убывают с течением времени по экспоненциальному закону $\exp(-t/T_1)$, где T_1 – время продольной релаксации. Кроме того, величина отклика уменьшается также с увеличением времени задержки КС относительно ПС по закону $\exp(-t/T_2)$, где T_2 – время фазовой памяти. Спустя некоторое время $t<T_1$, на образец поступает считывающий импульс с равномерным в полосе ΔF спектром, поле которого ориентировано, как и у двух других (ПС и КС), вдоль оси Y, а энергия достаточна для поворота спинов на 90°. При этом векторы $\boldsymbol{M}^+$ и $\boldsymbol{M}^-$ будут положены в плоскость XY (первый – в направлении –X, второй – в направлении +X) и начнут прецессировать в поле $\boldsymbol{B}$. Заметим, что скорости прецессии ядер, образовавших вектор $\boldsymbol{M}^-$, таковы, что за время τ они приобретают набег фазы на π больше, чем соответствующие им ядра, образовавшие $\boldsymbol{M}^+$. Поэтому за время τ после считывания векторы, ранее располагавшиеся по всей плоскости XY, сойдутся в одну полуплоскость (рис.

11, пункт 4) и в СТ наведется вектор результирующей намагниченности – эхо.

В качестве примера рассмотрим поступление на спиновое тело сигнала и копии в виде М-последовательности с фазовой манипуляцией. Каждая пара импульсов этой последовательности даст эхо. Так как эхо от всех импульсов в ПС возникает спустя время τ после считывании его соответствующим импульсом в КС, то при совпадении фаз высокочастотных составляющих образуется суммарное эхо – результат суммирования элементарных эхо.

Таким образом, эхо в спиновом теле является в определенном смысле аналогом сигналов, полученных на выходе согласованного фильтра или взаимокорреляционного приемника. Из приведенной выше модели физических явлений в СТ следует, что спектральная и фазовая структуры сигнала и копии не должны отличаться. Только при этом условии (воздействии КС на те же ядра, что и ПС) вся плоскость векторов, образованная копией, будет повернута на угол θ и образует пару запоминаемых в СТ векторов $\boldsymbol{M}'$ и $\boldsymbol{M}''$. И только при этих условиях будет происходить синфазное суммирование элементарных эхо. Поэтому можно сказать, что эхо является функцией взаимной корреляции КС и ПС.

После воздействия на СТ импульсов ПС, КС и СИ (считывающий импульс) и возникновения эхо-сигнала спины отклоняются от направления поля $\boldsymbol{B}$ и прецессируют в нем. С течением времени из-за процессов релаксации угол при вершине конусов прецессии уменьшается, и через время продольной релаксации можно считать, что все спины СТ имеют преимущественную ориентацию в направлении оси Z и СТ готово к записи очередного ПС.

Необходимо заметить, что особенность свертки сложных сигналов в СТ состоит в том, что она является следствием определенной пространственной ориентации магнитных моментов ядер, т. е. как бы сверткой в пространстве. Свертка же в согласованном фильтре (СФ) есть следствие соответствующих временных задержек составляющих сигнала из-за специальной (комплексно-сопряженной с сигналом) фазочастотной характеристики СФ и является, по существу, сверткой во времени.

Таким образом, рассмотренная выше модель спинового тела обеспечивает: возбуждение и запоминание ВЧ – сигналов (ПС и КС), включая их фазовые структуры, за время T_1; перемножение запоминаемых сигналов ПС и КС; интегрирование результата перемножения; запоминание результатов интегрирования спектральных составляющих ПС и КС со знаком «плюс» или «минус» в зависимости от частоты этих составляющих (от скорости ларморовой прецессии соответствующего спина); суммирование (свертку) всех возбужденных колебаний и появление эхо-сигнала после СИ, спустя время задержки ПС относительно КС; зависимость результата свертки от схожести фазовых структур ПС и КС и нечувствительность к начальной фазе КС (аналогично СФ); ограничение времени запоминания интервалом T_2 и восстановление свойств запоминания через время $T_1 > T_2$; требование широкополосности СИ, полоса спектра которого должна быть не менее полосы ПС и КС; селективное ограничение мощных сигналов; затухание запоминаемого сигнала во времени (зависимость величины эха от задержки ПС относительно КС). Описанную выше модель можно представить эквивалентной схемой (рис. 12).

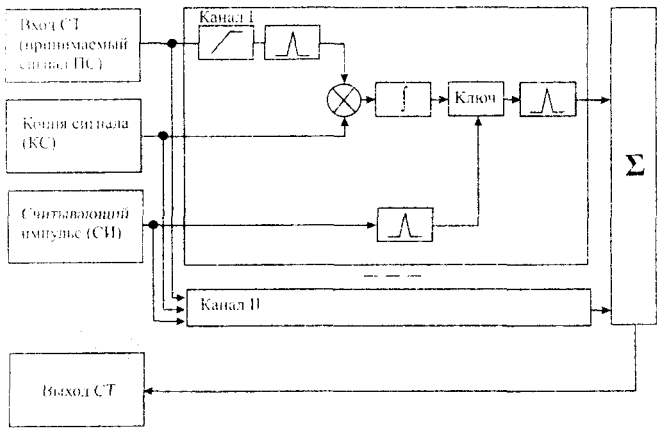


Рис. 12. Эквивалентная схема спинового тела

Согласно предложенной эквивалентной схемы, спиновое тело представлено как набор большого числа каналов, состоящих из последовательно соединенных ограничителя, узкополосного резонатора, перемножителя, интегратора и схемы считывания. Последняя, в свою очередь, состоит из узкополосного резонатора и ключа. Схемы считывания соединены с входами линейного сумматора, выход которого является выходом спинового тела. Представленная эквивалентная схема достаточно полно отображает процессы, происходящие в спиновом теле при свертке сложных сигналов, и будет ниже использована при анализе работы эхо – процессоров.

2.2.2. Эхо – процессор как устройство обработки сигналов

Явление спинового эха сегодня используется для получения информации о структуре исследуемых образцов. Возможность изучения свойств твердого тела на атомном или молекулярном уровне является одним из основных достоинств ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Полученная информация о микроскопических свойствах вещества по макроскопическим наблюдаемым величинам (частота, ширина резонансных линий, их расщепление и времена релаксации) тесным образом связана с теми конкретными взаимодейст-

виями, которые ответственны за спектр магнитного резонанса. Значительное место в ЯМР – исследованиях занимает изучение электронно-ядерных взаимодействий, которые используются для выяснения электронного строения и природы химической связи в молекулах и твердых телах. Это направление использования получило название ЯМР – спектроскопии. Однако дальнейшее развитие функциональной электроники показало, что наиболее перспективным для практического внедрения в жизнь является использование эхо – процессоров при передаче, приеме, обработке и запоминании информации.

Ценность обработки радиочастотных сигналов с помощью эффекта эха, состоит в том, что временное положение и форма эхо – отклика однозначно связаны с относительной временной расстановкой и структурой возбуждающих сигналов. Варианты функционального использования эхо – процессоров, основанные на двух- и трехимпульсных методах взаимодействия сигналов представлены на диаграммах (рис. 13-21).



Рис. 13. Управляемая задержка импульсов: *а* – двухимпульсный метод задержки сигнала во времени с инверсией (п. 1, рис. 11 – зеркальное эхо), *б* – без инверсии (п. 2, рис. 11 – прямое эхо)

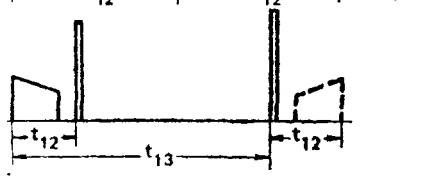


Рис. 14. Управляемая задержка импульсов, трехимпульсный метод задержки с инверсией спектра

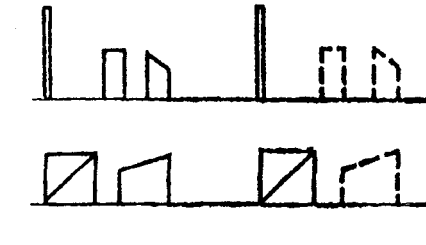
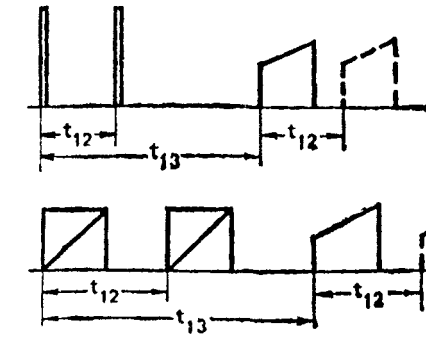


Рис. 15. Управляемая задержка импульсов, трехимпульсный метод задержки сигнала без инверсии при различной временной расстановке управляющих сигналов (преимущество – большое допустимое время задержки)



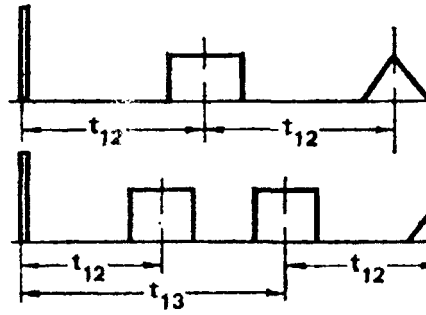


Рис. 16. Корреляционная и весовая обработка сигналов: *а* – свертка сигнала соответствующая квадрату его спектра, *б* – образование взаимокорреляционной функции двух сигналов

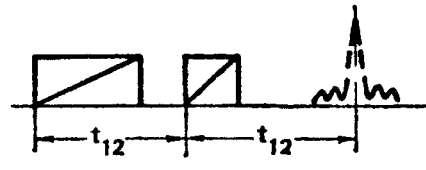


Рис. 17. Корреляционная и весовая обработка сигналов: временная свертка сигналов (сжатие ЛЧМ сигналов по двухимпульсному методу)

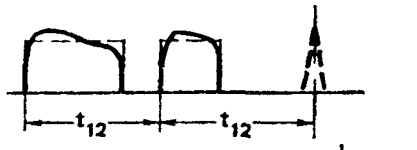


Рис. 18. Корреляционная и весовая обработка сигналов: временная свертка сигналов с весом

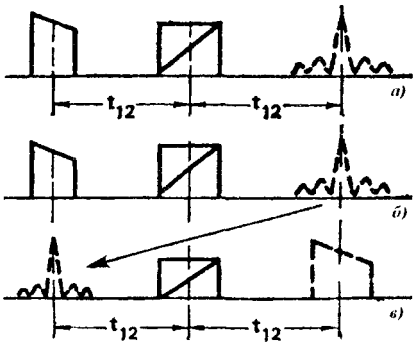


Рис. 19. Одновременный спектральный анализ сигналов: *а, б* – получение модуля спектра огибающей по двухимпульсному методу (с инверсией), *в* – двойное преобразование Фурье

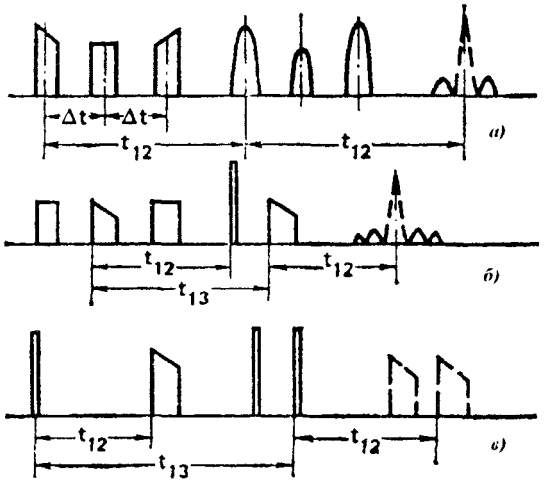


Рис. 20. Когерентное накопление, корреляционный анализ и формирование импульсных последовательностей: *а* – когерентное сложение некоррелированных между собой импульсов, *б* – корреляционный анализ по трехимпульсному методу, *в* – формирование последовательностей по трехимпульсному методу, *г* – когерентное сложение корреляционных откликов, образованных парами импульсов с одинаковым временным разнесением

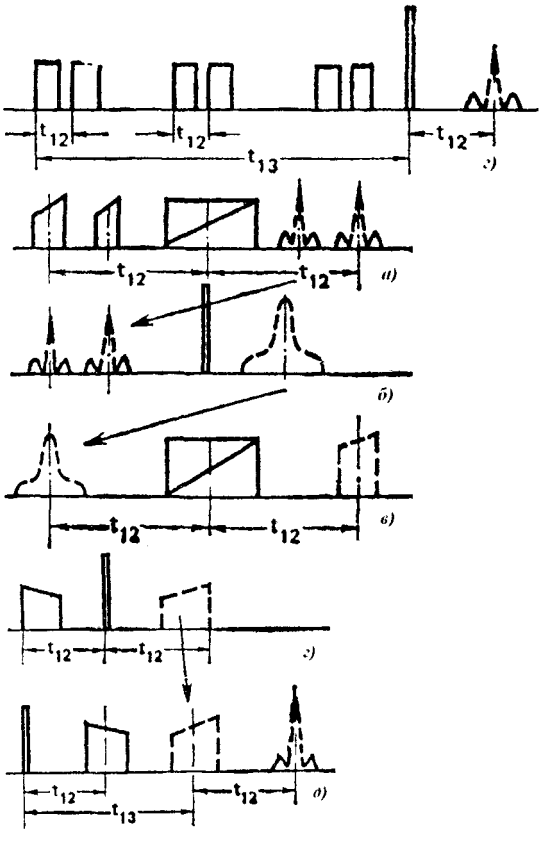


Рис. 21. Комбинированная обработка сигналов, перемножение огибающих двух радиоимпульсов при сохранении частоты заполнения: *а* – получение спектров исходных сигналов (1-й процессор), *б* – получение свертки сигналов (2-й процессор), *в* – эхо сигнал перемножения огибающих (3-й процессор) и автокорреляционная функция произвольного сигнала с использованием его инвертированного образа: *г* – задержка по двухимпульсному методу (1-й процессор), *д* – полученная АКФ (2-й процессор)

На диаграммах входные сигналы изображены как видеоимпульсы различной формы. 90- и 180-градусные возбуждающие сигналы представлены в виде коротких прямоугольных импульсов с большой амплитудой, эхо-сигналы – пунктирной линией. Паразитные отклики, возникающие в эхо – процессоре, для простоты понимания не учитываются.

Как видно из диаграмм (рис. 13 – 21), временное положение и форма эхо – отклика однозначно связаны с относительной временной расстановкой и структурой возбуждающих сигналов. Это свойство является весьма ценным для радиотехники. Однако при попытках практической реализации этого свойства эхо – процессоров выявился ряд серьезных трудностей, связанных с особенностями физической сущности различных видов эхо – процессоров. В частности, использование эха, наблюдаемого в парамагнитных средах, в настоящее время и в ближайшем будущем весьма проблематично из-за необходимости применения сложных внешних магнитных систем, совершенно неприемлемых энергетических соотношений и малой информационной емкости. Лучшие результаты можно получить в случае использования электронного эха, однако и в этом случае сохраняются поляризующие магнитные системы. Кроме того, требуемое время обработки обеспечивается за счет использования криогенной техники.

Перспективы практической реализации эхо – процессоров связываются специалистами с использованием ЯМР в ферромагнитных средах [12]. В этом случае необходимая поляризация ядер обеспечивается за счет внутренних локальных полей. Кроме того, в подобных средах при наблюдении сигналов ЯМР имеют место даже эффекты усиления возбуждающих сигналов и эхо – откликов. Основные параметры эхо – процессора определяются физическими свойствами рабочего вещества. Так, например, для ферромагнетиков диапазон рабочих частот составляет 30 – 300 МГц, полоса пропускания – 0,5 – 20 МГц, время ввода и обработки сигналов определяется временем продольной T_1 (20 – 1000 мкс) и поперечной T_2 (200 – 500 мкс) релаксации (время поперечной релаксации определяет время памяти спинового эхо – процессора, а время продольной релаксации – время его восстановления). Однако необходимо отметить, что эхо – процессоры, выполненные на объемных ферромагнетиках (типа ферритов), по таким характеристикам, как переходное затухание и динамический диапазон, значительно уступают традиционным устройствам обработки. Для преодоления этих недостатков предложено использовать в ЯМР эхо – процессорах в качестве рабочих веществ многослойные тонкие магнитные пленки. В этом случае, помимо устранения указанных выше недостатков, открывается возможность значительного улучшения массогабаритных характеристик ЯМР эхо – процессоров.

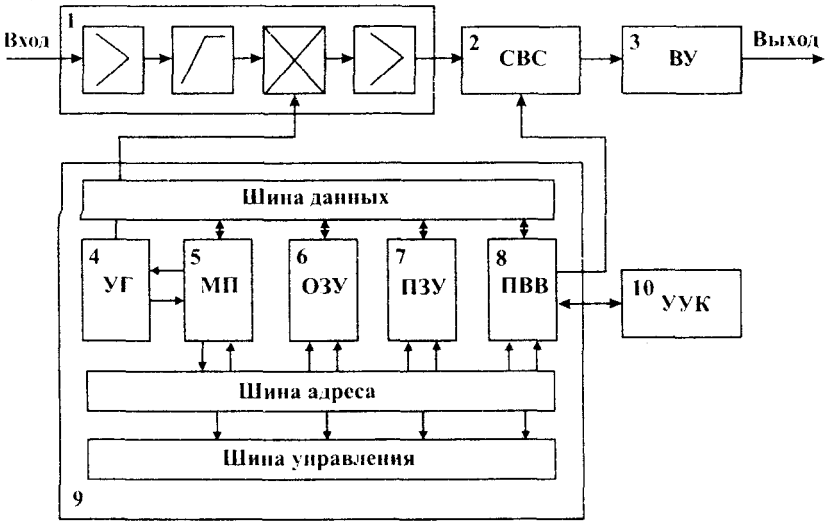


Рис. 22. Структурная схема многофункционального устройства обработки сигналов на базе ЯМР: 1 – входной усилитель-преобразователь; 2 – система возбуждения и съема сигнала ЯСЭ; 3 – выходной усилитель; 4 – управляемый генератор (таймер); 5 – микропроцессор; 6 – оперативное запоминающее устройство; 7 – постоянное запоминающее устройство; 8 – порт ввода-вывода; 9 – программируемый микроконтроллер; 10 – устройство управления и контроля (наборное поле с дисплеем)

Рассмотрим ряд конкретных примеров возможного использования ЯМР эхо – процессоров в смежных областях вычислительной техники, в частности в системах связи и спектрального анализа, в частности программируемого многофункционального устройства обработки сигналов на базе ЯМР. Структурная схема процессора приведена на рис. 22. Приведенный пример хорошо иллюстрирует потенциальные возможности оптимального сочетания функциональной электроники и микропроцессорной техники. Устройство обработки сигналов позволяет решать целый ряд разнообразных задач, таких, как управляемая задержка радиосигналов, корреляционная обработка и сжатие сложно модулированных сигналов, спектральный анализ и др., причем структурная схема устройства не изменяется, а переход с одной задачи на другую осуществляется программными методами.

Обрабатываемые радиосигналы поступают на входной усилитель, с выхода которого они подаются на систему возбуждения рабочего вещества. Конструктивно эта система может быть выполнена в раз-

личных вариантах, но цель в любом случае одна – преобразовать энергию входного сигнала в магнитную энергию возбуждения рабочего вещества, обладающего эффектом ядерного спинового эха. Для функционирования устройства необходимо также подавать на рабочее вещество вспомогательные импульсы, которые формируются под управлением микропроцессора, обеспечивающего также синхронизацию и управление работой отдельных блоков. В качестве рабочего вещества целесообразно использовать ферромагнитные материалы в виде тонких пленок.

Это позволяет, во-первых, получать сигнал ЯСЭ без воздействия внешнего постоянного магнитного поля и, во-вторых, эффективно использовать возбуждающее переменное магнитное поле. Поскольку переходное затухание сигнала ЯСЭ составляет обычно величину порядка 40 – 60 дБ, на выходе устройства необходимо включить выходной усилитель, чтобы поднять сигнал ЯСЭ до уровня, необходимого для дальнейшей обработки. Известно, что динамический диапазон входных сигналов, подаваемых на перспективные устройства обработки информации, должен составлять 80 – 140 дБ, в то время как динамический диапазон рабочего вещества значительно ниже. Поэтому очевидным является применение в качестве входных усилителей с нелинейной амплитудной характеристикой, например усилителей-ограничителей или логарифмических усилителей, позволяющих сжать динамический диапазон поступающих сигналов.

Частоты ядерного магнитного резонанса рабочих веществ могут лежать в широком диапазоне, достигая сотен мегагерц, где создание миниатюрных усилителей с нелинейной амплитудно-частотной характеристикой сопряжено с определенными трудностями. Поэтому для сопряжения по частоте входного спектра и рабочих частот спинового тела необходимо предусмотреть преобразователь частот, опорное напряжение на который подается с микроконтроллера в заданные моменты времени. Программируемый микроконтроллер (ПМ) может быть выполнен на базе микропроцессора (МП) и содержит, кроме того, управляемый генератор (УГ), оперативное запоминающее устройство (ОЗУ), постоянное запоминающее устройство (ПЗУ) с записанным в него программным обеспечением, а также интерфейсы входа и выхода. Переход с одного режима работы на другой происходит либо по команде оператора (с наборного поля), либо автоматически по программе.

2.3. Возможности систем связи при использовании эхо – процессоров [12, 13]

Значительные перспективы открываются при использовании эхо – процессоров в многоканальных системах связи с синхронным и асинхронным многостанционным доступом (радиолинии с искусственными спутниками Земли). В этом случае приемник и передатчик сложного сигнала значительно разнесены между собой, что вызывает необходимость формирования копии обрабатываемого сигнала для осуществления корреляционной свертки в месте приема. Как правило, используются два способа формирования копий: в месте приема сигнала (взаимокорреляционный прием – ВКП) и в месте передачи сигнала (автокорреляционный прием – АКП). При АКП в качестве копии используется сам сигнал, повторенный либо в приемном устройстве через интервал T (длительность обрабатываемого сигнала), либо в передающем через интервал τ (время задержки, большее времени корреляции обрабатываемого сигнала). В первом случае АКП называют относительным корреляционным приемом в отличие от ВКП – абсолютного корреляционного приема во втором случае (метод Ланге), в котором допускается применение сигналов в виде выборок реального шума и корреляционно-временной модуляции. Уточним функции эхо – процессора при реализации перечисленных выше методов передачи и приема сигналов.

На рис. 13-15 приведены варианты использования эхо – процессоров в схемах управляемой задержки импульсов и формирования импульсных последовательностей (рис 20*в*), которые могут быть применены при генерации сложных сигналов и их копий. Эти применения эхо – процессоров аналогичны традиционному использованию. Однако выполнение эхо – процессором корреляционной обработки принимаемых сигналов (наиболее важной операции в технике связи) приводит к следующим интересным и нетрадиционным решениям (рис. 16-18).

Как известно, при оптимальном приеме существуют схемы с корреляторами (активными фильтрами) и согласованными фильтрами (пассивными фильтрами). Первые производят сжатие сложных сигналов по частоте, вторые – по времени. В эхо – процессоре происходит корреляционное взаимодействие сигналов, что приводит к перемножению исходных спектров и сжатию обрабатываемых сигналов во времени. Эхо – процессор не накладывает никаких ограничений на выбор типа и способа модуляции, но, как было показано выше, являясь квантовым устройством обработки аналоговых сигналов, в результате временного стробирования и сжатия он дискретизирует непрерывные во времени сигналы. После необходимой додетекторной обработки полученной последовательности радиоимпульсов на выходе решающего устройства приемника восстанавливается исходное информационное сообщение. Учитывая рассмотренное выше сочетание свойств активных и пассивных фильтров в эхо – процессоре, его выделяют в особый вид фильтрующих устройств – корреляционные согласованные фильтры (КСФ).

В системах связи с ВКП и КСФ организация многостанционного доступа абонентов к ретрансля-

тору (ИСЗ) в части методов разделения каналов и видов модуляции сигналов принципиально не отличается от известных многоканальных систем со сложными сигналами. ВКП с КСФ обладает наилучшей помехоустойчивостью, поскольку синтезируемая в месте приема копия сигнала свободна от шумов канала связи. Основное же отличие заключается в принципе канальной синхронизации входного сигнала и его копии. Эхо – процессор, обладая конечной памятью T_2, после записи копии не накладывает жесткого ограничения на задержку сигнала. Отклик имеет место даже при расхождении копии и сигнала до интервала T_2, что заметно облегчает вхождение в синхронизм по времени. Кроме того, существенной особенностью эхо – процессора по сравнению с согласованными фильтрами является возможность изменения структуры сигналов и весовых коэффициентов в зависимости от степени поражения помехой, что повышает помехозащищенность системы в целом.

Еще больший эффект в синхронизации сигнала и копии можно получить при использовании эхо – процессоров в системах связи, построенных по схеме Ланге при АКП. В этом случае эхо – процессор в качестве КСФ осуществляет асинхронный многостанционный доступ к ретранслятору. В процессе фильтрации кодовое разделение каналов преобразуется во временное, что дает большой эффект при усилении группового сигнала в нелинейных каскадах передатчика ретранслятора.

Кроме того, формирование задержки копии в передающем устройстве абонентской радиостанции позволяет распространить метод Ланге на многоканальные системы связи. Начальная фаза эха определяется разностью фаз коррелирующих импульсов, которая задается в передающем устройстве, и фазой управляющего радиоимпульса, формируемого в приемнике. Благодаря этому облегчается синхронное детектирование при оптимальной обработке сигналов.

Все рассмотренные выше особенности, а также возможность работы с генерируемыми сложными сигналами в виде выборки реального шума позволяют рассчитывать на существенное упрощение аппаратуры как абонентских радиостанций, так и ретрансляторов, устанавливаемых в ИСЗ в асинхронных системах связи.

Известно, что в автокорреляционных линиях радиосвязи допускаются значительно большие нестабильности канала связи по сравнению с взаимокорреляционными (эффект Доплера, нестабильность генераторов и т. п.). В условиях многолучевого распространения (КВ- и УКВ-диапазоны) при АКП пары сигналов и копии с одинаковым временным сдвигом между собой на входе эхо – процессора будут когерентно суммироваться в единый эхо – сигнал (рис. 20*г*) независимо от временных, частотных и фазовых сдвигов сигналов каждого луча относительно друг друга. Таким образом, эхо – процессоры расширяют класс схем АКП. Они позволяют создать схему согласованной фильтрации, в которой устраняется существенный недостаток АКП (сравнительно невысокая устойчивость к сосредоточенным станционным помехам).

Рассмотренные особенности построения систем связи с использованием спиновых эхо – процессоров позволяют сделать вывод о перспективности и больших возможностях применения ЯМР эхо – процессоров при передаче, приеме и обработке аналоговой и дискретной информации.

2.4. Спектральный анализ радиосигналов в реальном времени на основе использования эхо – процессоров [14, 15]

Если на систему ядерных спинов СТ, находящихся под воздействием собственного внутреннего постоянного магнитного поля, воздействовать магнитными полями трех радиоимпульсов (по трехимпульсному методу), то в момент времени $t=T+\tau_3$ появится сигнал спинового эха. Спектральная функция такого эхо-сигнала может быть записана в виде

$$S_{эхо}(j\omega) = M_0\gamma^3 /[4g(\omega)\dot{S}_1(j\omega)\cdot\dot{S}_2(j\omega)\cdot\dot{S}_3(j\omega)e^{-j\omega(T+\tau_3)}],$$

где $\dot{S}_i(j\omega)$ – спектральные функции импульсов; M_0, γ – постоянные СТ; $g(\omega)$ – форма линии поглощения СТ; $t_0 = T+\tau_3$ – момент появления сигнала спинового эха. В этом случае сигнал на выходе СТ можно записать в виде: $v(t) = \mathrm{Re}\left\{\frac{1}{2\pi}\cdot M_0\gamma^{3/4}\int_{-\infty}^{\infty} g(\omega)S_{эхо}(j\omega)e^{j\omega t}d\omega\right\}$.

Учитывая, что спиновое тело обладает определенной полосой ларморовских частот (полосой частот ядерного резонанса) ω_1–ω_2, введем ограничение на спектральную функцию первого поступающего на СТ радиоимпульса. Она должна быть постоянной в полосе ларморовских частот, т. е. $S_1(j\omega) = \Lambda_0$ при $\omega_1 < \omega \le \omega_2$. В качестве второго импульса будем использовать сигнал, спектр которого необходимо измерить. Его спектральную плотность запишем как $S_2(j\omega) = \int_0^{\tau_u} f(\tau)e^{j\omega\tau}d\tau$. Очевидно, что полоса частот спектра исследуемого сигнала также не должна превышать полосы частот ЯМР. Чтобы обеспечить управление такими параметрами анализатора, как разрешающая способность и полоса анализируемых частот, выберем в качестве третьего подаваемого радиоимпульса сигнал с линейной частотной модуляцией (ЛЧМ) длительностью $\tau_{чм}$, девиацией частоты $2\Delta f_\delta$. Спектр такого сигнала представим в виде

$S_3(j\omega) = (\pi/2\beta)^{1/2} \exp\{-j[(\omega-\omega_0)^2/2\beta - \pi/4]\}$, где β=2π2Δ$f_д$/$\tau_{чм}$ – скорость изменения частоты в импульсе. Подставим полученные функции спектров радиоимпульсов в выражение для сигнала на выходе СТ и, упростив, получим:

$$v(t) = B\,\mathrm{Re}\{e^{j\theta(t)} \int_0^{\tau_и} f(\tau) e^{-j\omega(\beta t+\omega\tau)} d\tau\}.$$

Интеграл в полученном выражении есть не что иное, как прямое преобразование Фурье на частоте $\omega(t)=\beta t+\omega_0$. Таким образом, сигнал на выходе СТ, управляемом двумя вспомогательными импульсами (первым и третьим), описывается преобразованием Фурье от входного сигнала, что позволяет определить его как спектр входного сигнала. Наличие фазового множителя $e^{j\theta(t)}$ показывает, что, подав выходной сигнал СТ на фазовый детектор, можно получить также фазовый спектр анализируемого сигнала. Длительность анализируемых сигналов ограничивается неравенством $\tau_и << (\tau_{чм}/2f_д)^{1/2}$, а разрешающая способность анализатора определяется как $\Delta\omega_0 = 2(nm)^{1/2}/\tau_{чм} = (2\beta)^{1/2}$, где m=2Δ$f_0\tau_{чм}$.

Из выражения видно, что, изменяя параметры второго вспомогательного импульса, такие, как длительность $\tau_{чм}$ и величину девиации частоты, можно управлять параметрами анализатора спектра.

Связь между осью времени и осью частот, определяющая частотный масштаб изображения спектра, описывается выражением $\Delta f_c = k\Delta t$, где масштабный коэффициент $k=\beta/2\pi$ (кГц/мкс).

Таким образом, процесс анализа спектра в ЯМР – анализаторе сводится к тому, что спектр анализируемых сигналов записывается в виде углов поворота ядерной намагниченности рабочего материала в пределах его спектра. За счет одновременного возбуждения всех ядерных спинов входным сигналом, а затем последовательного считывания накопленной информации управляющим импульсом удается получить однозначное соответствие между временем и частотой.

В качестве примера приведем результаты экспериментальных исследований анализатора спектра [17], блок-схема которого изображена на рис 23.

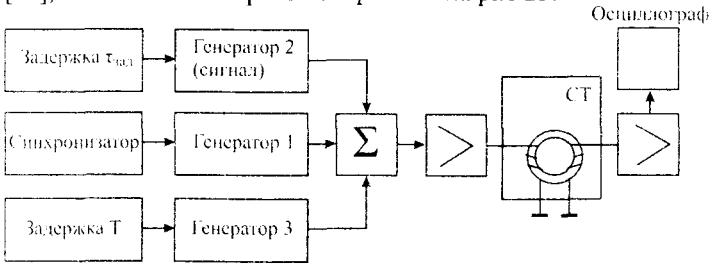


Рис 23. Блок-схема ЯМР – анализатора спектра

Генератор 1 вырабатывает первый вспомогательный сигнал амплитудой 30 В и длительностью 0,2 мкс, так как в качестве спинового тела использовался никелевый феррит NiF_2O_4, обогащенный изотопом Fe^{57}, тороидальной формы, на который наматывались витки катушки выходного каскада. Полоса ЯМР равнялась 2 МГц, центральная частота – 72 МГц. Генератор 2 вырабатывает сигнал, спектр которого необходимо измерить (короткий радиоимпульс), генератор 3 вырабатывает второй вспомогательный импульс с ЛЧМ.
Результаты экспериментальной проверки ЯМР анализатора спектра приведены в табл. 2.

Таблица 2

Длительность импульса $\tau_и$, мкс	Ширина спектра Δt, мкс	Экспериментальная Δf=kΔt, МГц	Теоретическая Δf=2/$\tau_и$, МГц	ЛЧМ-сигнал	
				$\tau_{чм}$, мкс	2Δ$f_д$, МГц
1	61	1,97	2,0	64	2
2,6	24	0,76	0,77	64	2
4	14	0,43	0,5	64	2
5	10	0,3	0,4	64	2

Из таблицы видно, что погрешность измерения спектра минимальная при выполнении условия $\tau_и << (\tau_{чм}/2\Delta f_д)^{1/2}$. В отличие от традиционных анализаторов спектра ЯМР – анализаторы определяют спектр каждого поступающего импульса, что позволяет, в частности, оценить изменения спектра от импульса к импульсу и в ряде случаев, упростить оценку тонкой структуры спектров.

Развитию измерительных средств, в частности, радиоспектроскопии и ее применений, в частности, в физике твердого тела, способствовало совершенствование импульсных методов ЯМР, особенно ЯМР высокого разрешения в твердых телах. Тем не менее, в научной практике для исследования твердых тел продолжают широко использоваться стационарные методы, что объясняется в первую очередь возможностью прецизионного воспроизведения формы спектра поглощения ЯМР слабовозмущенной системы ядерных спинов.

Возможности стационарных методов ЯМР значительно расширяются при использовании сильных магнитных полей. Это позволяет регистрировать тонкую структуру спектров ЯМР. Успехи в создании криогенных магнитных систем позволяют конструировать высокоэкономичные и простые приборы для исследований твердых тел методом непрерывного ЯМР в сильных магнитных полях. Для иллюстрации возможностей современных ЯМР спектроанализаторов рассмотрим возможную (с точки зрения доступности элементной базы) структурную схему спектрометра ЯМР широких линий с криомагнитной системой (рис. 24).

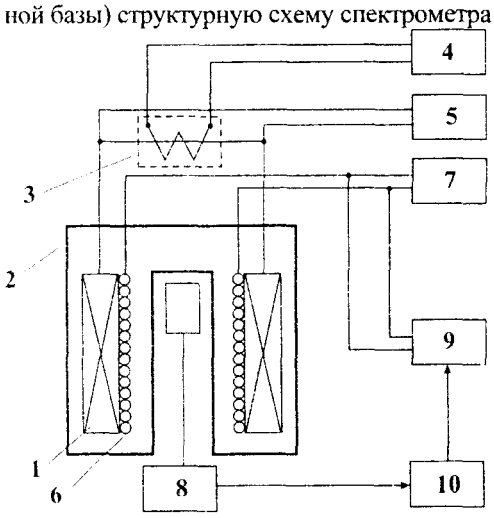


Рис. 24. Структурная схема спектрометра ЯМР с криомагнитной системой: 1 – сверхпроводящий соленоид; 2 – гелиевый криостат; 3 – сверхпроводящий ключ; 4 – блок управления ключом; 5 – источник запитки соленоида; 6 – обработка развертки; 7 – блок развертки поля; 8 – датчик ЯМР; 9 – самописец; 10 – низкочастотный тракт спектрометра

Основу криогенной магнитной системы прибора составляет гелиевый криостат со сверхпроводящим соленоидом, управление полем которого обеспечивается электронной схемой. Гелиевый объем подвешен на трех тонкостенных трубках. Конструктивные особенности предполагают испаряемость криостата в режиме хранения до 0,6 л жидкого гелия в сутки, а время работы при однократной заливке гелия – до 6 недель. Криостат имеет теплое отверстие, форма которого позволяет устанавливать в нем устройство для регулирования температуры исследуемого образца. Предусмотрена возможность герметизации рабочей полости криостата. Соленоид с внутренним пазом намотан из сверхпроводной проволоки (например, НТ-50) на дюралевом каркасе. Однородность поля соленоида в объеме 1 см^3 должна составлять $8 \cdot 10^{-6}$. Поле соленоида возбуждается от специального источника питания, основанного на принципе промежуточного преобразования. Средняя мощность переменной составляющей на нагрузке при максимальном токе не должна превышает 10^{-4} Вт, что позволит переводить соленоид в «замороженное» состояние.

Для записи сигналов ЯМР в данном приборе может быть использованы внешние сигналы развертки. В основе схемы лежит мост, плечи которого состоят из двух одинаковых источников питания и переменных резисторов. Нагрузка включена в одну из диагоналей моста, причем вследствие нулевого сопротивления дополнительной сверхпроводящей обмотки соленоида сопротивление нагрузки определяется только сопротивлением подводящих проводов. Параллельно нагрузке моста подключена Х-координата двухкоординатного самописца. Полное изменение тока в нагрузке должно соответствовать суммарной развертке поля на 200 Э при нелинейности не более 0,4%. Выбор датчика ЯМР будет являться одним из важнейших условий удачного построения спектрометра. Предлагается в качестве датчика ЯМР использовать 2Т-мост Андерсона, СТ к которому подключено через отрезок коаксиального кабеля. Схемы остальных блоков в основных чертах близки к решениям, принятым для большинства спектрометров ЯМР низкого разрешения.

Весьма эффективным представляется применения эхо – процессоров в медицине. Известно, какую революцию в диагностике заболеваний произвели в свое время рентгеновские лучи. Рентгеновское исследование пациентов стало сегодня одним из основных методов диагностического исследования в современной медицине. С другой стороны, известны и существенные недостатки рентгеновского излучения, в частности вред, наносимый им организму человека, и слабое разрешение при исследовании внутренних органов. Пытаясь преодолеть указанные недостатки, ученые обратили внимание на ценные качества ЯМР – процессоров, которые получают последние при использовании их совместно с микропроцессорной техникой. В результате был создан ЯМР – томограф, позволяющий осуществить послойную радиолокацию внутренних органов человека. Поскольку в качестве носителя информации использованы безвредные для человека радиоволны, то использование ЯМР – томографа особенно предпочтительно при внутричерепных исследованиях мозга человека.

Эхо – процессоры могут помочь в исследованиях физики космоса. Известно, что распространение электромагнитных волн в межзвездной среде аналогично распространенно их в плазме, поскольку межзвездная среда содержит свободные электроны с концентрацией порядка 10^{-1}...10^{-2} 1/см^3. В результате имеет место дисперсия, т. е. зависимость фазовой (и групповой) скорости электромагнитных волн от частоты. Поэтому если некоторый источник, например пульсар, излучает импульсный сигнал с широким частотным спектром, различные частотные компоненты приходят к приемной антенне в различные моменты времени в соответствии с законом $\frac{dv}{dt} = \frac{c}{L} \cdot \frac{v^3}{v_p^3}$, где v – частота излучения, c – скорость света, L – длина пути, а v_p – собственная частота плазмы. У сигналов, излучаемых пульсарами в диапазоне частот 80 – 90 МГц, эксперимен-

тально наблюдается изменение частоты в принимаемом сигнале на величину 1 МГц длительности сигнала порядка 1 с. Эхо процессоры могут быть использованы в данном случае для восстановления начальной формы импульсов и их сжатия с целью повышения чувствительности приемной системы.

Приведенные выше примеры показывают уникальные возможности применения спинового эха при создании многофункциональных систем обработки радиотехнических сигналов, параметры которых определяются свойствами рабочих материалов.

2.5. Материалы спинового тела и технологические проблемы создания эхо – процессоров [16]

Дальнейшее направление работ в области создания устройств обработки радиотехнических сигналов на спиновом эхе связано с поисками оптимальных рабочих материалов, определяющих их свойства. Основными параметрами подобных устройств являются: рабочая частота; полоса пропускания; динамический диапазон; информационная емкость; длительность обрабатываемых сигналов; допустимая частота повторения; температурная стабильность; масса устройства; энергоемкость.

Соответственно можно сформулировать и основные характеристики рабочих материалов ЯМР – процессоров: частота магнитного резонанса; ширина спектра; максимальная амплитуда эха; переходное затухание; времена продольной (T_1) и поперечной (T_2) релаксации; температурная стабильность; информационная емкость. Рассмотрим кратко основные особенности этих характеристик.

2.5.1. Частотный диапазон

Уникальные свойства ЯМР – процессоров определяется конкретным видом используемого типа резонансного явления в рабочем материале. Область частот электронного парамагнитного резонанса лежит в сантиметровом диапазоне длин волн, а область частот ЯМР в парамагнитных материалах – в метровом. Область частот ЯМР в магнитоупорядоченных веществах находится в диапазоне от единиц до тысяч мегагерц. Так, например, для ферромагнетиков диапазон рабочих частот 30 – 300 МГц (ЯМР на ядрах Fe^{57}, Co^{59}, Ni^{61} в различных соединениях), полоса пропускника 0,5 – 20,0 МГц, время ввода и обработки сигналов ограничены значениями времени релаксации 20 – 1000 мкс для T_2 и 200 – 500 мкс для T_1 при температуре 300 К. Однако при массивных ферромагнетиках (типа ферритов) по величинам переходного затухания и динамического диапазона ЯМР – процессоры уступают традиционным устройствам обработки. В некоторых процессорах в качестве рабочего вещества использовались ядра протонов в различных жидкостях. Основным недостатком таких процессоров являются большие габариты и масса, связанные с необходимостью создания постоянного магнитного поля.

Наибольший интерес представляют ЯМР – процессоры с магнитными материалами, в которых резонанс можно наблюдать во внутренних локальных полях в отсутствии внешнего магнитного поля. При использовании в эхо – процессорах в качестве рабочего тела пакетированных многослойных тонких магнитных пленок указанные недостатки устраняются, и одновременно обеспечивается возможность миниатюризации ЯМР – процессоров. Резонансные частоты ядер Fe^{57} лежат в диапазоне частот от 40 до 80 МГц, Cr^{53} – 40 – 70, Ni^{61} – 25 – 60, Co^{59} – 100 – 220, Mn^{55} – 300 – 700, редкоземельных элементов – 500 – 5000 МГц.

2.5.2. Динамический диапазон

Максимальный динамический диапазон ЯМР – процессора определяется логарифмом отношения максимальной амплитуды эха к напряжению шумов. Амплитуда ядерного эха зависит от многих причин, в частности от количества ядер, величины магнитного момента, коэффициента усиления радиочастотного поля, температуры образца.

2.5.3. Информационная емкость

Для ЯМР – процессора эта характеристика определяется произведением полосы пропускания на максимальную длительность обрабатываемого импульса. Информационная емкость процессора ограничивается информационной емкостью материала, определяемой как произведение ширины спектра на время поперечной релаксации. Максимальная длительность сигнала определяется временем поперечной релаксации, а допустимая частота повторения – временем продольной релаксации.

2.5.4. Температурная стабильность

Стабильность технических характеристик ЯМР – процессоров в основном определяется температурной стабильностью параметров материала в заданном интервале температур.

В настоящее время исследованы и являются перспективными для устройств на эффекте спинового эха следующие магнитные материалы.

2.5.5. Ферриты со структурой граната

Феррогранаты достаточно подробно исследовались методом ЯМР. Ферриты-гранаты с общей формулой $Me_3Fe_5O_{12}$ (где Me – ионы редкоземельных металлов или иттрия) имеют объемноцентрированную кристаллическую решетку. Ионы иттрия (или элементов группы редких земель) складываются в додекаэдрическую подрешетку. Ионы трехвалентного железа могут занимать октаэдрические и тетраэдрические позиции. При замещении в ферритах ионов железа на ионы галлия, индия и

алюминия, кальция и ванадия частота ЯМР понижается, а спектр заметно расширяется.

2.5.6. Ферриты со структурой шпинели

В элементарной ячейке ферритов со структурой шпинели, имеющих общую формулу $MeFeO_4$ (где Me – ион двухвалентного металла), содержится 8 ионов железа, которые располагаются в тетраэдрических положениях, и 16 ионов – в октаэдрических. Спектр ЯМР, например, для никелевого феррита состоит из двух линий, отстоящих друг от друга (по частоте) на 5 МГц. Частота 67,5 МГц соответствует резонансу ядер трехвалентного железа, находящихся в тетраэдрических положениях, частота 72,5 МГц соответствует резонансу ядер железа, находящихся в октаэдрических положениях. Время релаксации T_1 = 3 мс, T_2 = 0,5 мс.

2.5.7. Гексагональные ферриты

В области составов $BaO\text{-}MeO\text{-}Fe_2O_3$ (где Me – ион двухвалентного металла) возможен синтез различных магнитных соединений, получивших название M-, W-, Z-, Y-структур. Наличие большого поля анизотропии в гексагональных ферритах приводит к малым значениям коэффициента усиления радиочастотного поля. Поэтому интенсивность сигналов ЯМР в гексагональных ферритах на порядок меньше, чем в ферритах со структурой граната для шпинели.

2.5.8. Пленки металлов и сплавов

Использование пленок металлов и сплавов в ЯМР – процессорах является весьма перспективным и продолжает привлекать к себе внимание ученых, инженеров, технологов, поскольку они в ряде случаев позволяют получить сильные сигналы ядерного эха. Например, в пленках железа, обогащенного изотопом Fe^{57}, наблюдается сильное ядерное эхо на частоте 46,6 МГц, полоса ЯМР составляет 0,3 МГц, время релаксации T_2=5 мс, T_1=10 мс. Большое количество работ посвящено исследованию ЯМР в пленках кобальта. В этих пленках удается создать одноосную анизотропию и сориентировать магнитные моменты в плоскости пленки в процессе их напыления в магнитном поле. Поле одноосной анизотропии в кобальтовой пленке составляет величину 16 Э, что значительно меньше поля кристаллографической анизотропии порошкообразного кобальта. Благодаря большому ядерному моменту, стопроцентному естественному содержанию изотопа кобальта и малому полю анизотропии в пленках наблюдаются следующие параметры ЯМР: f_0=213 МГц, Δf=10 – 12 МГц, T_1=135 – 170 мкс, T_2=26 – 28 мкс, коэффициент переходного затухания – 30 – 40 дБ.

2.5.9. Антиферромагнетики

Наиболее полно методом ЯМР исследованы слабые антиферромагнетики $FeBO_3$ и FeF_3. Спектр ЯМР от ядер Fe^{57} в $FeBO_3$ при 300 К состоит из одной интенсивной линии на частоте 46,4 МГц, полоса частот – 30 кГц, коэффициент усиления радиочастотного поля – 10^6, T_1=100 мкс, T_2=90 мкс. Интересной особенностью $FeBO_3$ является то, что его доменная структура может быть оптически управляемой под воздействием лазерного излучения.

Исследования антиферромагнетика FeF_3 на ядрах F^{19} и Fe^{57} показали, что при температуре жидкого гелия спектр состоит из широкой линии в диапазоне частот 55 – 83 МГц и одной узкой линии на частоте 84,94 МГц. Широкий спектр принадлежит ядрам F^{19}, а узкий – Fe^{57} (T_1=0,3 мс, T_2=0,08 мс).

2.5.10. Редкоземельные металлы и аморфные сплавы

Использование редкоземельных металлов позволяет получать ядерный магнитный резонанс на частотах от 150 МГц (ядра европия) до 6,5 ГГц (ядра гольмия). Интересные результаты получены на ядрах редкоземельных металлов, растворенных в матрице гадолиния (гадолиний имеет сравнительно малое поле анизотропии – 600 Э). Растворением редкоземельных металлов в гадолинии добиваются уменьшения общего поля анизотропии и, следовательно, увеличения интенсивности сигналов. Кроме того, использование материалов в виде пленок также позволяет повысить эффективность явления ЯМР. Так, например, установлено, что при оптимальной мощности возбуждающих импульсов амплитуда сигнал-эхо с пленки примерно в 10 раз превосходит сигнал от 1 см^3 порошкового материала с размеров частиц 50 мкм. При этом время продольной и поперечной релаксации, полученное на пленках, практически не отличается от аналогичных в объемных материалах.

Проведенные исследования аморфных соединений, в которых наблюдался резонанс на ядрах Co^{59}, B^{11}, P^{31} и др., показали возможность использования ленты аморфного сплава $Fe_5Co_{70}Si_{15}B_{10}$ в качестве рабочего материала ЯМР – процессора. Сплав имеет проницаемость 280000 Гс/Э (содержит 84 массовых % кобальта). Спектр ЯМР от пачки из 100 отрезков аморфной ленты размером 10х0,05 мм^3 занимает частотный диапазон от 100 до 180 МГц; ширина спектра – 40 МГц, время поперечной релаксации – 20 мкс.

Таким образом, в настоящее время имеется достаточно большой выбор материалов для рабочего тела ЯМР – процессоров. Дальнейшее совершенствование ЯМР – устройств связано с поисками оптимальных рабочих материалов.

2.6. Фононные эхо – процессоры [18]

В отличие от спинового процессора, фононный эхо – процессор, обладая аналогичными функциональными возможностями, позволяет реализовать память до нескольких суток в диапазоне частот 5 – 100 МГц. Явление фононного эха заключается в том, что кристаллический порошок ряда пьезоэлектриков, помещенный, например, в плоский конденсатор колебательной системы и подвергнутый воздействию определенной последовательности электромагнитных импульсов от внешнего генератора, сам излучает электромагнитный импульс той же частоты в некоторый последующий момент времени (через время задержки).

Механизм формирования сигналов фононного эха заключается в следующем. Электрическая компонента первого высокочастотного (ВЧ) импульса, поданного в момент времени $t=0$ на колебательную систему с рабочим веществом, возбуждает в кристаллах порошка за счет линейного пьезоэффекта упругие волны (фононы) тех же частот. С течением времени происходит рассогласование упругих волн по фазе из-за различия скоростей распространения для волн разной поляризации, из-за различия в направлениях волнового вектора, из-за упругого рассеяния на дефектах кристалликов. Электрическое поле второго ВЧ – импульса в момент времени $t=\tau$, взаимодействуя с упругими волнами, возбуждаемыми первым импульсом, приводит за счет диэлектрической нелинейности кристалликов к рождению упругих воли с теми же частотами, с теми же фазовыми соотношениями, но с противоположными направлениями волнового вектора.

Если упругие волны рассогласовались по фазе, распространяясь в прямом направлении в течение времени τ, то при распространении в обратном направлении они снова окажутся в фазе через такой же интервал времени τ. В результате в момент времена $t=2\tau$ сфазированные упругие волны (фононы) создадут за счет обратного пьезоэффекта электрический сигнал тех же частот, который представляет собой сигнал двухимпульсного эха, обычно используемый в качестве динамической задержки в оперативных запоминающих устройствах (ОЗУ).

Наиболее интересными и уникальными свойствами обладает трехимпульсное фононное эхо. Процесс образования трехимпульсного эха определяется тем, что взаимодействие между упругими волнами, возбужденными первым импульсом и электрическим полем второго импульса, приводит за счет нелинейных эффектов к образованию в кристалле электрического поля и механического напряжения, постоянных во времени и периодических в пространстве с периодом упругой волны, т. е. приводит к записи упругой волны в момент времени τ. Эта запись является фактически акустической голограммой. Для того чтобы такая запись не исчезала после окончания действия второго импульса и затухания звуковой волны, необходима фиксация ее при помощи, например, перераспределения тока на примесных уровнях. Электрическое поле третьего импульса, действуя на такой электрический рельеф в момент времени T, порождает упругие волны с противоположным направлением волнового вектора. Так же как и в случае двухимпульсного эха, эти волны окажутся в фазе через время τ после подачи третьего импульса, т. е. дадут сигнал стимулированного эха в момент времени $T+\tau$. Образованный «электрический рельеф» на дислокациях и дефектах кристаллической решетки может существовать несколько суток, что и определяет время памяти T_1 при трехимпульсной методике. Временная диаграмма образования эхосигналов показана на рис. 25.

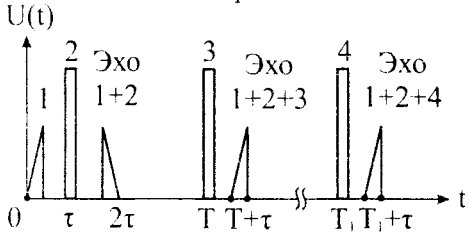


Рис. 25. Временная диаграмма образования фононного эха

Полученные сигналы фононного эха обусловлены электрической компонентой переменного ВЧ – поля, создаваемой пьезоэлектрическими колебаниями отдельных кристалликов. Этими колебаниями индуцируется периодический макроскопический электрический дипольный момент, который наводит на обкладках конденсатора, между которыми находится рабочее тело, хорошо наблюдаемый сигнал фононного эха. Его интенсивность может достигать 0,1 – 1,0 В. Изменение рабочей частоты импульсов возбуждения подключает к участию в фононном эффекте кристаллики с другими линейными размерами, что обеспечивает наблюдение эха в диапазоне частот от единиц до сотен мегагерц.

В качестве примера использования фононного эхо – процессора рассмотрим корреляционно – фильтрационную (временное сжатие) обработку сигналов с линейной частотной модуляцией и фазокодовой модуляцией бинарной М-последовательностью максимальной длины.

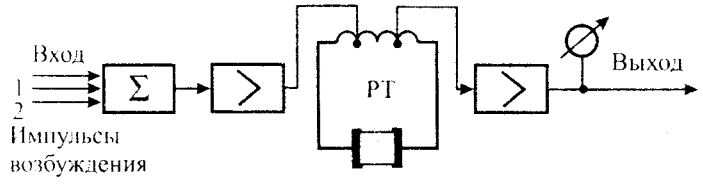


Рис. 26. Структурная схема фононного эхо – процессора

Структурная схема фононного эхо – процессора (рис. 26) содержит сумматор обрабатываемых и вспомогательный сигналов, усилитель мощности, нагрузкой которого является колебательный контур с рабочим телом, помещенным между обкладками конденсато-

ра, усилитель сигналов фононного эха и индикатор.

Для уверенного возбуждения сигналов фононного эха амплитуда напряжения возбуждающих импульсов на конденсаторе с рабочим телом должна лежать и пределах 20 – 100 В. При этом максимальная мощность, выделяемая в контуре, составляет 3 – 4 Вт.

В рассмотренном примере в качестве веществ рабочего тела могут быть использованы: порошок ниобата лития, легированного в процессе роста кристаллов ионами двухвалентного железа ($LiNbO_3$ + 0,4% вес. Fe), германат висмута $Bi_{12}GeO_5$ и калий бромоватокислый $KBrO_3$ с размерами частиц в диаметре не более 50 мкм. Конструктивно зазор между обкладками цилиндрического конденсатора должен составлять 0,8 мм, емкость конденсатора с веществом ориентировочно лежит в пределах 25 – 40 пФ. Экспериментальная проверка макета [19, 20] проводились в диапазоне частот 60 – 80 МГц. Результаты исследование приведены в табл. 3.

Таблица 3

Вещество	τ_0, мкс	Δf, МГц	τ, мкс	T, ч	τ_0, мкс	Выходное напряжение, В		Переходное затухание, дБ	
						двухимпульсное эхо	трехимпульсное эхо	двухимпульсное эхо	трехимпульсное эхо
$LiNbO_3$	30	2,5	30	24	0,6	0,4	0,19	-45	-51,4
$Bi_{12}GeO_{20}$	30	2,5	30	24	0,6	0,6	0,17	-44,4	-55,4
$KBrO_3$	30	2,5	30	24	0,6	0,05	0,03	-66	-70,4

Сжатие сигналов с фазокодовой модуляцией (ФКМ) бинарной М-последовательностью проводилось по методике, показанной на рис. 27.

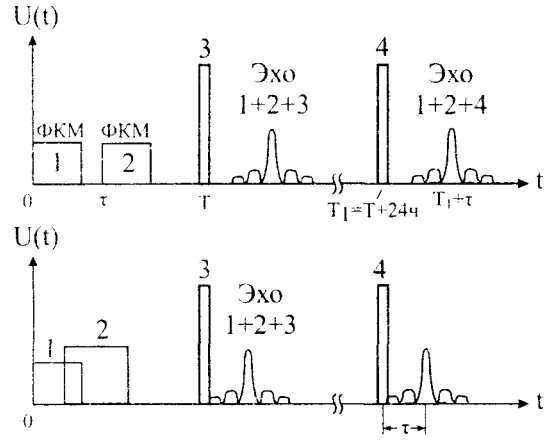


Рис. 27. Схема сжатия ФКМ – сигналов в фононном эхо – процессоре

Длительность элементарного импульса М – последовательности составляет 0,5 мкс, число элементов последовательности – 127, длительность короткого считывающего импульса – 0,5 мкс. Результаты экспериментов [19, 20] приведены в табл. 4.

После отключения всех взаимодействующих импульсов сжатый сигнал фононного эха можно вновь получить путем подачи только одного третьего импульса (см. рис. 27). Эта память сохраняется в течение нескольких суток. Широкополосность рабочего вещества позволяет обрабатывать в фононном эхо – процессоре одновременно и независимо несколько сигналов, не перекрывающихся по спектру.

Из приведенных примеров видно, что фононный эхо – процессор при практически любых заданных воздействиях является аналогом согласованного фильтра, обладающего как динамической памятью при двухимпульсном режиме сжатия, так и квазистатической (долговременной) памятью при трехимпульсном режиме сжатия. Последнее свойство позволяет многократно обращаться к памяти эхо – процессора, что может быть очень ценным при специфических методах обработки радиотехнической информации. Следует ожидать, что фононные и спиновые эхо – процессоры в ближайшем будущем найдут применение в специальных информационно-измерительных системах (радиолокация, радиоразведка, целенаведение и др.).

Таблица 4

Вещество	τ_0, мкс	Δf, МГц	τ, мкс	T, ч	τ_0, мкс	U, В	Переходное затухание, дБ
$LiNbO_3$	63,5	2,5	5	24	0,6	0,57	-45
$Bi_{12}GeO_{20}$	63,5	2,5	5	24	0,6	0,49	-48

2.7. Фотонные эхо – процессоры [21, 22]

Исследования ученых привели к открытию явления стимулированного светового (фотонного) эха. В частности, световое эхо, впервые наблюдавшееся в рубине, оказалось новым мощным методом оптической спектроскопии. Эхо-сигналы являются нелинейными запаздывающими когерентными откликами резонансной среды на воздействие определенных последовательностей возбуждающих когерентных им-

пульсов. Наибольшее применение в технике (в частности, в спектроскопии) нашли в настоящее время сигналы первичного (двухимпульсного) и стимулированного (трехимпульсного) эха. Несмотря на принципиальное различие физических явлений, происходящих при возникновении спинового, фононного и фотонного эха, между ними просматривается глубокая аналогия.

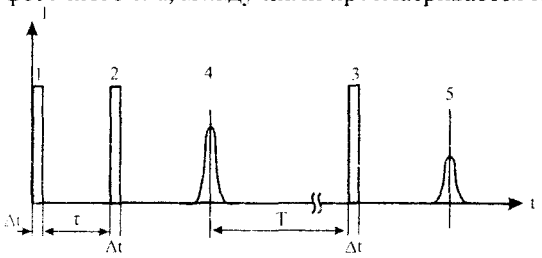


Рис. 28. Временная диаграмма образования сигналов светового (фотонного) эха: 1, 2 – записывающие световые импульсы; 3 – считывающий импульс; 4 – двухимпульсное первичное эхо; 5 – трехимпульсное стимулированное эхо

На рис. 28 показана временная диаграмма образования сигналов светового (фотонного) эха. Однако существенно новым моментом для техники светового эха оказалось (аналогично фононным эхо – процессорам) открытие долговременного (в течение нескольких минут) стимулированного светового эха на длине волны возбуждающих импульсов λ=0,4777 мкм в кристалле LaF_3, активированного ионами Pr^{3+}.

Обращая внимание на взаимосвязь эховых и оптических методов обработки, можно утверждать, что обработка радиосигналов методом трехимпульсного спинового эха может быть интерпретирована, в терминах голографии. Например, явление спинового эха можно сопоставить с процессом записи и воспроизведения Фурье-голограммы. При таком способе записи на фотопластинке регистрируется интерференция двух волн, комплексные амплитуды которых в плоскости голограммы являются Фурье – образами предмета и опорного источника. В простейшем случае, когда используется точечный опорный источник, голограмма представляет собой простую синусоидальную решетку. Аналогично этому под действием двух δ-образных импульсов продольные компоненты изохромат амплитудно модулируются по закону $\cos(\Delta\omega\tau_{12})$. Промодулированный двумя первыми импульсами спектр продольных компонент соответствует Фурье-голограмме. Если первый (информационный) сигнал имеет сложную форму $f(t)$, то амплитуда сигнала эха, возникающего после третьего (считывающего) δ-образного импульса, будет $\sim f^*(-t)$, что в голографии соответствует восстановленному сопряженному изображению предмета. К сожалению, в отличие от голограммы, систему промодулированных изохромат нельзя закрепить и информация будет «забываться» с характеристическим временем спин-решеточной релаксации T_1. Однако, с другой стороны, это позволяет записывать и хранить некоторое время различные радиочастотные сигналы последовательно в одном образце.

Впервые на возможность использования спинового эха в качестве «голофона» (временного аналога голографии) было указано в работе [23]. Предлагалось применять явление спинового эха для распознания образов. Естественно, роль распознаваемого образа здесь играет некоторый радиочастотный сигнал.

Рассмотрим более простые аналогии. Известно [24], что распространение одномерного светового сигнала $f(x)$ в свободном пространстве описывается преобразованием вида: $f(x^1) \sim \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\exp\left[\frac{i\cdot 2\pi(x-x^1)^2}{\lambda y^1}\right]dx$, где y^1 – расстояние от плоскости объекта до плоскости изображения.

Смоделировать распространение светового сигнала в свободном пространстве мы можем путем подачи на спиновую систему достаточно длинного радиочастотного сигнала с квадратично меняющейся фазой, т. е. с линейно меняющейся частотой заполнения. К сожалению, за один проход сигнала через спиновую систему, возможно смоделировать лишь простые оптические системы, содержащие только один участок свободного пространства (рис. 29).

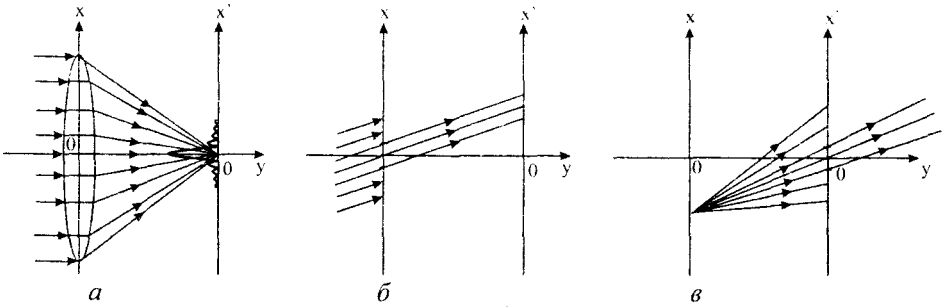


Рис. 29. Простые оптические системы

Известно, что если y^1 равно фокусному расстоянию линзы, то система (рис. 29*а*) с точностью до квадратичного фазового множителя производит Фурье-преобразования входного сигнала $f(x)$ [25]. По-

скольку прохождение оптического сигнала $f(x)$ через линзу эквивалентно линейной частотной модуляции радиочастотного сигнала, то для получения Фурье – спектров методом спинового эха, можно на спиновую систему подать предварительно линейно-частотно-модулированный (ЛЧМ) сигнал, а затем достаточно длинный (так, чтобы его спектр полностью покрывал спектр промодулированного входного сигнала) прямоугольный ЛЧМ импульс.

Если скорость изменения частоты в ЛЧМ импульсе в два раза больше, чем в первом сигнале, двухимпульсное эхо будет описываться следующей формулой: $f_э(t+2\tau_{12}) \sim \exp\left(\frac{i \cdot A \cdot t^2}{2}\right) \cdot \bar{f}(At)$ где A – скорость изменения частоты в первом сигнале. Очевидно, что и трёхимпульсная методика также позволяет получать Фурье-преобразования входных сигналов.

Таким образом, система на спиновом эхе, соответствующая оптической системе, приведенной на рис. 29*б*, будет переводить частотный сдвиг входного сигнала во временный сдвиг сигнала эха, а соответствующая системе, приведенной на рис. 29*в*, производить обратное преобразование.

Для точности заметим, что системы на спиновом эхе не могут перемножать функции друг друга. Подобные операции, необходимые, например, для моделирования линз и диафрагм, должны производиться обычными радиотехническими средствами. Возможности по обработке радиочастотных сигналов существенно расширяются, если применять цепочки из обычных радиотехнических устройств и систем. В качестве примера такого удачного сочетания рассмотрим акустооптоэлектронный анализатор спектра, структура аппаратных средств которого приведена на рис. 30.

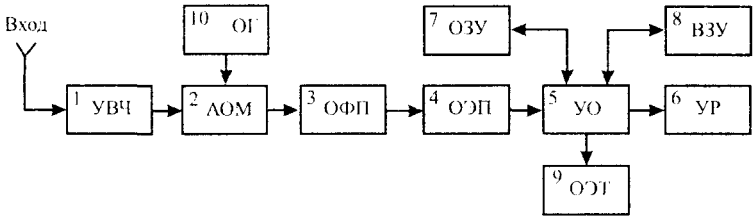


Рис. 30. Акустооптоэлектронный анализатор спектра: 1 – усилитель высокой частоты; 2 – акустооптический модулятор; 3 – оптический Фурье-процессор; 4 – оптоэлектронный преобразователь (на ПЗС); 5 – устройство обработки (микро-ЭВМ); 6 – устройство регистрации (термопечать); 7 – оперативное запоминающее устройство (оптический эхо-процессор); 8 – внешнее запоминающее устройство (на ЦМД); 9 – оптоэлектронное табло; 10 – опорный генератор

Анализируемый сигнал через усилитель высокой частоты поступает на оптический Фурье-процессор. Для сопряжения радио- и оптического диапазонов используется акустооптический модулятор, выполненный например на ПАВ [19]. Для обратного преобразования оптических сигналов в электрические используется оптоэлектронный преобразователь на ПЗС. Устройство обработки электрических сигналов основано на микро-ЭВМ, быстродействующее оперативное запоминающее устройство которого выполнено на оптическом эхо – процессоре. Для долговременного хранения результатов обработки используется внешнее запоминающее устройство на ЦМД. Итоговые результаты отображаются на жидкокристаллическом индикаторе и регистрируются на термопечатающем устройстве. Основным достоинством рассмотренного анализатора спектра является его высокое быстродействие и широкополосность за счет оптимального сочетания оптических и электрических методов обработки.

В качестве иллюстрации возможности использования световых эхо – процессоров рассмотрим вариант построения запоминающего устройства большой емкости (10^{15} бит) и плотности записи (10^{12} бит/см^3) при среднем времени записи, считывания и обращения 1 нс/бит. В основе подобного ЗУ лежит использование явления стимулированного светового эха в кристалле трехфтористого лантана, активированного ионами трехвалентного празеодима. Для записи бита информации в этом случае используются два следующих друг за другом через малое время τ (порядка нескольких наносекунд) световых импульсов (см. рис. 28) длительностью $\Delta t < \tau$ с волновыми векторами, направленными под углом друг к другу и пересекающимися в заданной ячейке оптической памяти объемом около 1 мкм^3. Третий, считывающий импульс, следующий через время $T >> \tau$ после первого, вызывает появление в момент времени $T+\tau$ сигнала стимулированного светового эха, несущего информацию о проведенной ранее в соответствующей ячейке записи информации. Схема устройства для осуществления такой записи, порядок воздействия возбуждающих лазерных импульсов и моменты генерации эхо-сигналов может быть синтезирована согласно диаграмме структур показных на рис. 28 и 31.

Предлагаемое ЗУ предназначено для на хранение информации до 5 мин [26]. Поэтому для перезаписи 10^{15} бит информации с временем обновления около 3 нс/бит потребуется 10^4 лазеров. Таким обра-

зом, конструкция ЗУ включает в себя матрицу из 100×100 лазерных диодов [6], систему отклонения лучей электрооптического типа [6], обеспечивающую наведение пересекающихся лучей в любую из 10^{15} ячеек памяти с точностью 0,1 мкм и фокусировку в объеме около 1 мкм^3, охлаждаемый (3 К) неструктурированный кристалл LaF_3 с примесью Pr в качестве хранителя информации объемом 1 дм^3 и матрицу фотоприемников.

Отметим что, несмотря на определенные трудности практической реализации подобных запоминающих устройств (осуществление точной, до 0,1 мкм, адресации лучей в любую ячейку объемом 1 мкм^3, повышение надежности, снижение габаритов и т. п.), оптические ЗУ привлекают внимание специалистов в силу целого ряда их преимуществ.

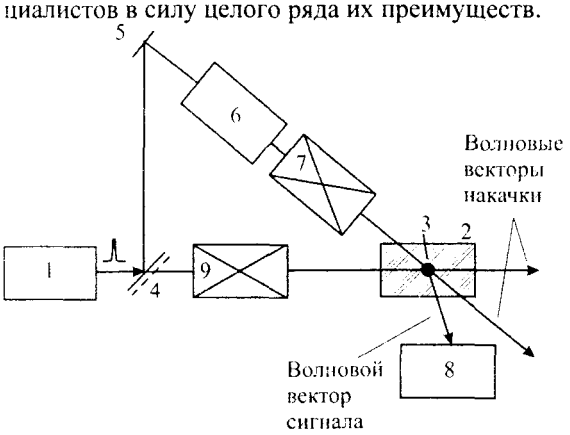


Рис. 31. Блок-схема ЗУ на основе фотонного эхо: 1 – импульсный лазер; 2 – кристалл; 3 – ячейка памяти; 4 – делитель луча; 5 – зеркало; 6 – линия задержки; 7 – оптический затвор; 8 – фотоприемник; 9 – элемент отклонения луча

Это – исключительно высокие плотности записи (10^{12} бит/см^3) за счет использования неструктурированного носителя информации, позволяющего вести запись в объеме тела; отсутствие электрических соединений между элементами памяти (общее свойство элементов функциональной электроники); возможность произвольной выборки информации в отличие от других систем оптической записи (видеодиски); относительно малое потребление энергии для хранения (перезаписи) информации в ЗУ; возможность быстрого стирания записанной информации; отсутствие высокопрецизионной (субмикронной) технологии, необходимой, например, при производстве полупроводниковых сверхбольших интегральных схем [1, 5, 27].

Выводы

Процессы ускорения научно-технического прогресса требуют внедрения в практику перспективных приборов и устройств передачи, обработки и хранения информации. Большие надежды в этом направлении связывают в настоящее время с внедрением новых многофункциональных квантовых приборов – эхо – процессоров. К сожалению, данное направление развития функциональной электроники очень слабо освещено в литературе.

В настоящей работе предпринята попытка восполнить этот пробел и с единых позиций рассмотреть принципы построения и функционирования эхо – процессоров, использующих различные физические явления, в частности, спиновое, электроакустическое, фотонное, фононное и другие виды эха. Все они достаточно специфичны, однако общие принципы применения эховых явлений, рассмотренные выше, вполне к ним применимы.

Необходимо отметить сложность внутренних физических процессов в эхо – процессорах. Большое количество рассмотренных практических применений показывает перспективность использования УФЭ в вычислительной технике обработки радиосигналов и в смежных областях, в частности, в измерительной технике, связи, медицине и т. п.

По всей видимости, по мере накопления знаний о физических явлениях потенциально пригодных для создания устройств функциональной электроники, будут расширяться и области их практического применения.

Известно, что особенно много открытий сделано в последнее время в тех областях, которые находятся на стыке различных наук, и направлений техники. Устройства функциональной электроники – яркий пример этому. Однако механизмы используемых явлений, а также параметры возможных рабочих веществ требуют более глубокого и всестороннего изучения.

РЕЗЮМЕ

Процеси пришвидшення науково-технічного прогресу потребують впровадження в практику перспективних приладів і пристроїв передачі, обробки та збереження інформації. Великі надії в цьому напрямку пов'язують з впровадженням в цей час нових багатофункціональних приладів на основі принципів функціональної електроніки. В статті розглядаються будова й принцип дії процесорів на спіновій, електроакустичній, фотонній та фононній луні.

SUMMARY

The rapid scientific and technical progress requires the introduction into practice of perspective devices and appliances of data transmission, processing and storage. At present the introduction of new multifunctional devices based on func-

tional electronics principles seems to be promising. This article deals with the construction and operating principle of processors based on spin, electroacoustical, photon and phonon echo.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Щука А.А. Электроника. Под ред. проф. А.С. Сигова. – СПб.: БХВ-Петербург, 2006.
2. Федотов Я.А. Функциональная электроника. – М.: Высшая школа, 2000.
3. Мартынов В.В., Базарова Т.Е. Технология полупроводниковых приборов и изделий микроэлектроники. Литографические процессы. – СПб.: Наука и Техника, 2003.
4. Гуляев Ю.В. Проблемы современной радиотехники и радиоэлектроники. – М.: Наука, 2001.
5. Кузнецов Ю.А., Шилин В.А. Микросхемотехника БИС на приборах с зарядовой связью. – М.: Радио и связь, 2000.
6. Розеншер Э., Винтер Б. Оптоэлектроника: Пер. с франц. – М.: Техносфера, 2004.
7. Кочемасов Е.Н., Долбня Е.В. Соболь Н.В. Акустоэлектронные Фурье – процессоры. – М.: Радио и связь, 1987.
8. Соколов С.А. Оптимальная обработка сложных сигналов при помощи эффекта спинового эха // Сб. трудов Рязанского радиотехнического института. – 2001. – №5. – С. 74-81.
9. Хорунжий В.А., Долбня Е.В., Богатов П.Н. Акустоэлектроника. Под ред. В. А. Хорунжего. – К.: Техника, 1984.
10. Абрагам А. Ядерный магнетизм. – М.: Иностранная литература, 1963.
11. Леше А. Ядерная индукция. – М.: Иностранная литература, 1963.
12. Устинов В.Б., Репников С.П., Сааков Э.О., Теряев В.А. Ядерный магнитный резонанс в тонких кобальтовых пленках // ФТТ. – 1968. – Т. 10. – С. 236-239.
13. Исследование и разработка модулятора фазы для систем имитации радиосигналов. Итоговый отчет о НИР №02860042446 Московского института радиотехники, электроники и автоматики, 1999.
14. Никитов В.А., Никитов С.А. Исследование и разработка устройств на магнитостатических спиновых волнах // Зарубежная радиоэлектроника. – 2000. – №12. – С. 41-52.
15. Данилов В.В., Литвиненко В.И., Роганов Л.М. Чуркин А.В. Невзаимные устройства СВЧ диапазона. Информационно-управляющие и вычислительные комплексы на основе новых технологий. Наука и маркетинг // Тезисы докладов Всероссийской научно-технической конференции с международным участием. – СПб. – 1992, – С.135-138.
16. Куневич А.В., Филиппов В.В. Материалы для устройств на эффекте спинового эха. – М.: Наука, 2001.
17. Данилов В.В., Литвиненко В.И., Роганов Л.М., Чуркин А.В. Генераторный СВЧ – модуль. Информационно-управляющие и вычислительные комплексы на основе новых технологий. Наука и маркетинг // Тезисы докладов Всероссийской научно-технической конференции с международным участием. – СПб. – 1992. – С.136-138.
18. Данилов В.В. Материалы и технология реализации акустооптических устройств // Материалы VI -й международной Крымской конференции «СВЧ – техника и телекоммуникационные технологии». – Севастополь. – 1996. – С. 452-455.
19. Данилов В.В., Жук В.В. Сверхразрешение оптических систем // Материалы международной научно-практической конференции «Современные информационные и электронные технологии». – Одесса. – 2005. – С.42-45.
20. Полухин Ю.Н., Рахаев А.А. Управление фазой и частотой с помощью гиромагнитных резонаторов // Материалы международной научно-практической конференции «Современные информационные и электронные технологии». – Одесса. – 2005. – С. 118-123.
21. Ахманов С.А., Ахмедиев Н.Н., Белинский А.В. и др. Новые физические принципы оптической обработки информации. Под ред. С.А.Ахманова и М.А.Воронцова. – М.: Наука, 1990.
22. Кирюхин Н.Н., Лисовский Ф.В. Магнитооптическое исследование автомодуляционных колебаний при параметрическом возбуждении спиновых волн в ЖИГ // Материалы международной научно-практической конференции «Современные информационные и электронные технологии». – Одесса. – 2005. – С. 223-226.
23. Природа. – М.: Знание, 1971.
24. Сороко Л.М. Основы голографии и когерентной оптики. – М.: Наука, 1971.
25. Папулис А. Теория систем и преобразований в оптике. – М.: Мир, 1971.
26. Петров В.В., Крючин А.А., Токарь А.П., Шанойло С.М., Сандул В.Я. Оптико-механические запоминающие устройства. – К.: Наукова думка, 1992.
27. Петров В.В., Крючин А.А., Шанойло С.М., Костюкевич С.А., Кравец В.Г., Лапчук А.С. Оптические диски: история, состояние и перспективы развития. – К.: Наукова думка, 2004.

Надійшла до редакції 05.11.2007 р.

УДК 621.396.22.029.7:681.7.068

ОПТОЭЛЕКТРОННЫЕ ЛОКАЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СЕТИ

М.В.Плыс, А.Н.Крыщенко, В.В.Данилов

Введение

Стремительный рост плотности и сложности сигналов при потребности их обработки в реальном масштабе времени, обусловили необходимость поиска новых физических принципов, позволяющих существенно повысить производительность вычислительных средств при снижении энергозатрат и массогабаритов аппаратуры.

Одним из направлений совершенствования представляется перспективным использование методов функциональной электроники, основным принципом которой является «...переход от микроминиатюризации микросхем к микроминиатюризации устройств и систем в целом» [1]. Функциональная электроника, уже сегодня насчитывает около восьми направлений, одним из которых является когерентная оптоэлектроника [1, 2].

Из известных способов снижения нагрузки на вычислительные средства является организация параллельных процессов обработки (организация локальных вычислительных сетей). Однако, применение перспективных полупроводниковых (кремниевой и арсенид-галлиевой) технологий изготовления микросхем, основного конструктивного элемента современных компьютеров и сетевых компонентов, не позволяет существенно повысить пропускную способность сетей из-за физических ограничений используемых линий передачи [3].

Известна высокая пропускная способность оптических волноводов. Однако, из-за присущих им дисперсии, трудностей создания соответствующей каналообразующей аппаратуры с приемлемыми энергозатратными и массогабаритными характеристиками, процесс их внедрения в вычислительную технику сдерживается.

Вычислительные сети содержат несколько уровней взаимодействия сетевых объектов, причем нижним является физический уровень, объектами взаимодействия в котором выступают приемопередатчики с кодерами и декодерами, и устройства их соединения с физической передающей средой. Протоколы физического уровня определяют требования к синхронизации, кодированию и декодированию, необходимые для передачи информации по физической среде той или иной конфигурации [3-6].

Физическая среда не входит в эти уровни, но вместе с аппаратными средствами нижнего уровня образует физические линии передачи данных между объектами сети. Естественно, что тип приемопередающих устройств, их характеристики определяются физической средой и требованиями к кодам, а выбор протоколов кодирования будет существенно зависеть от структуры физических линий, состава и характеристик их компонентов [6].

Настоящий обзор посвящен анализу возможности реализации оптоэлектронных вычислительных сетей (ОЭВС).

Аналогом сетей такого типа могут служить известные электронные локальные вычислительные сети (ЛВС), прототипом – магистральные волноводно-оптические связные сети. Физическими основами создания ОЭВС являются положения оптики, в частности, волоконной и планарной (интегральной).

При общности принципов построения коренное отличие локальных ОЭВС (ОЭЛВС) от электронных ЛВС заключается в уникальных свойствах волноводно-оптической среды передачи, что видоизменяет многие топологические и технико-экономические решения и существенно изменяет основополагающие характеристики сетей.

С волноводно-оптическими магистральными системами связи, ОЭВС роднит одинаковая среда передачи; отличие заключается в масштабах и топологии соединений, массовости соединений. Это не позволяет механически перенести в ОЭВС применяемые в линиях передачи систем связи технические решения. Например, проблема выбора кода. Возникает в любой системе связи и для ОЭВС еще более обостряется: широкий диапазон изменения длин линий связи в одной сети (от десятков метров до нескольких километров) и зависимость затухания сигнала от длины тракта приводят к большому энергетическому разбросу принимаемых сигналов, что затрудняет работу и усложняет схемы приемников; разнообразие сетевых конфигураций, методов множественного доступа, апериодический режим обмена сообщениями между абонентами сети усложняет выбор кодов и работу приемных устройств; массовость соединений предъявляет повышенные требования к простоте и стоимости приемопередающих и кодирующих устройств. По этим причинам коды, оптимальные для магистральных линий связи, не могут быть оптимальными для ОЭВС. Более того, для каждого конкретного типа ОЭВС должен выбираться свой код и обязательно с учетом критерия «эффективность – стоимость».

© Плыс М.В., Крыщенко А.Н., Данилов В.В.

Рассмотрим потенциально пригодные базовые компоненты физических соединений и протоколы кодирования физического уровня для создания ОЭВС.

1. Компоненты физических соединений

1.1.Физический уровень и физические соединения в ОЭВС

Вычислительная сеть определяется как совокупность определенных систем (элементов и устройств вычислительной техники и связи), связанных между собой физической средой передачи. Взаимодействие между системами должно быть организовано по многоуровневой схеме согласно эталонной модели международной организации стандартизации [7]. Два нижних уровня (физический и канальный) должны быть модифицированы под задачи конкретной локальной вычислительной сети (ЛВС).

Рассмотрим соединение физического уровня в соответствии с существующей концепцией стандарта на *FDDI*-сеть (Fiberoptic Distributed Data Interface) [3, 8]. Кольцевая сеть состоит из ряда станций и совокупности физических соединений между смежными станциями, образующие два независимых кольца с противоположными направлениями передачи.

Физический уровень *FDDI* имеет два подуровня:

– аппаратную среду, которая обеспечивает все операции, необходимые для передачи соответствующим образом закодированной информации от станции к станции через оптическую передающую среду. В состав аппаратной среды входят оптоэлектронные источники и приемники оптической мощности, а также оптические соединители, связывающие оптоэлектронные приборы с передающей средой (оптическим трактом);

– протокол физического уровня, который обеспечивает кодирование и декодирование проходящих через него данных, а также, установку и поддержание побитовой и посимвольной синхронизации принимаемых и передаваемых данных.

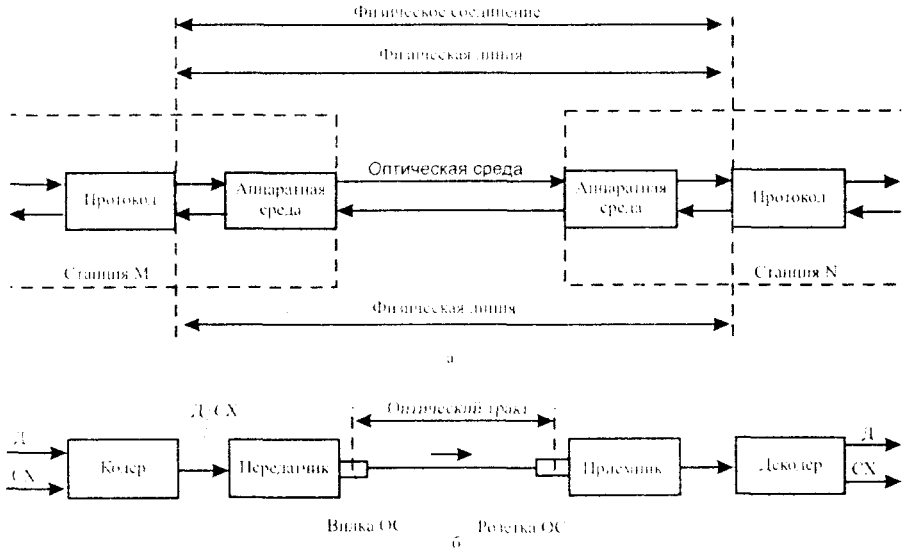


Рис. 1. Физический уровень *FDDI*-сети: *а* – состав физического соединения; *б* – структурная схема физической линии

Основной конструктивной единицей *FDDI*-сети является физическое соединение (рис. 1*а*). Физическое соединение *FDDI* состоит из аппаратной среды двух смежных станций, которые соединяются между собой через физическую передающую среду посредством первичной и вторичной линий. Физическая передающая среда не входит в уровни станций *FDDI*, она сама является общим (нулевым) уровнем всей сети.

Физическое соединение *FDDI* – полностью дуплексное соединение между смежными единицами аппаратной среды, т. е. пара односторонних физических линий. Структурная схема односторонней физической линии в общепринятом виде представлена на рис. 1*б*. Здесь кодер и передатчик станции М через оптический тракт соединены с приемником и декодером станции N. Данные (Д) и синхронизация (СХ) на вход кодера поступают с верхнего (канального) уровня станции М, обратная операция совершается в станции N. Оптический соединитель (ОС) содержит розетку (входит в конструктивное решение станции) и вилку (входит в состав светопровода).

Таким образом, в состав физической линии, основного конструктивного блока, допустим ОЭЛВС, должны входить оптический волновод, соединители, оптоэлектронные передатчик и приемник с кодером и декодером – базовые компоненты, присущие волноводно-оптической линии любой (двухточечной или

многоточечной) конфигурации.

С помощью двухточечных физических линий (линий прямой связи) можно строить сети кольцевой, звездообразной, древовидной и полносвязной топологий с активными узлами. Доступ к общей передающей среде в них осуществим непосредственно через оптоэлектронные компоненты.

Пассивные сети с топологиями шины и звезды могут быть созданы при использовании специфических распределительных элементов – оптических ответвителей и разветвителей. Вместе со спектральными мультиплексорами и оптическими переключателями (коммутаторами) они образуют аппаратные средства пассивного доступа к общей передающей среде в многоточечных и многоканальных системах. Этот обширный и весьма разнообразный класс устройств практически независим от основных функций физического уровня (передачи, синхронизации и кодирования информации), поэтому в настоящем обзоре они не рассматриваются.

1.2. Физическая передающая среда

1.2.1. Основные требования

Физическая передающая среда оказывает решающее влияние на характеристики ЛВС. В общем случае к ней предъявляются требования высокой скорости и надежности передачи информации, низкой стоимости, отсутствия шумов, механической прочности. Реализация, эксплуатация и модификация среды не должны вызывать затруднений. В настоящее время благодаря своим уникальным свойствам этим требованиям в наилучшей степени удовлетворяют оптические волокна (световоды).

Высокие скорость и достоверность передачи информации – главные достоинства ОЭЛВС. Конкретные требования к этим характеристикам должны определяться назначением и типом сети.

Различные требования к скоростям передачи и длинам физических линий могут быть удовлетворены только путем использования разных типов оптических волноводов, например, волоконно-оптических, передаточные характеристики которых определяются главным образом их геометрией, физическими параметрами, а также свойствами материалов.

1.2.2. Волоконно-оптические линии передачи для ОЭЛВС

Волоконно-оптический световод (ВОСв) представляет собой диэлектрический цилиндрический волновод, состоящий из световедущей сердцевины и оболочки, причем коэффициент преломления материала сердцевины n_1 несколько больше коэффициента преломления материала оболочки n_2. Наиболее широко используются кварцевые ВОСв, в которых сердцевина изготовлена из хорошо очищенного кварцевого стекла, показатель преломления которого n_1=1,45, а задержка распространения сигнала составляет ~5 нс/км. Оболочка кварцевых ВОСв чаще всего тоже кварцевая (разность в показателях преломления достигается за счет введения легирующих примесей в сердцевину или оболочку), реже – из полимерных материалов. Кроме кварцевых, могут использоваться полимерные (пластиковые) ВОСв.

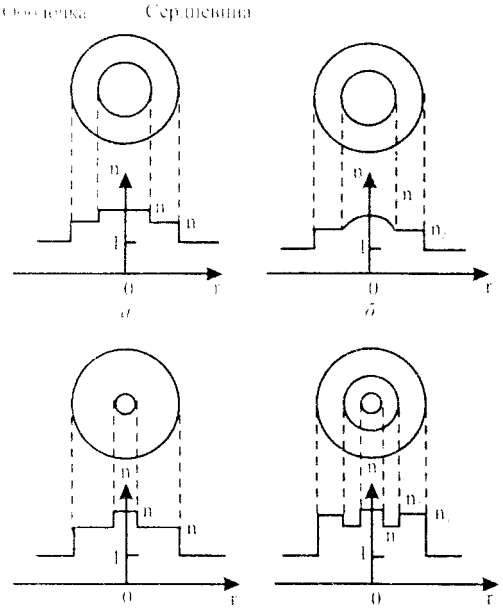


Рис. 2. Типы ВОСв: *а* – многомодовое ступенчатое, *б* – градиентное, *в* – одномодовое ступенчатое, *г* – одномодовое w- типа

Передаточные характеристики кварцевого ВОСв определяются преимущественно профилем показателя преломления (т. е. его зависимостью от расстояния r от оси волокна) и диаметром сердцевины волокна. На рис. 2 изображены поперечные сечения и профили показателей преломления ВОСв для применений в ОЭЛВС. Существующие волоконные световоды в зависимости от соотношения между радиусом сердцевины a и длиной волны оптического сигнала λ делятся на многомодовые ($a/\lambda > 5 - 10$) и одномодовые ($a/\lambda \approx 5 - 10$). Многомодовые ВОСв из-за сравнительно большого диаметра имеют много типов (мод) колебаний, в одномодовых – существует только один (продольный или осевой) тип колебаний.

В зависимости от профиля показателя преломления различают ступенчатые и градиентные ВОСв. В ступенчатых – показатель преломления сердцевины имеет постоянное значение и скачком изменяется на границе с оболочкой. В градиентных ВОСв показатель преломления от центра к краю поперечного сечения сердцевины уменьшается пропорционально квадрату расстояния от центра. Характер профиля показателя преломления и диаметр сердцевины существенным образом влияют на пропускную способность ВОСв. Например, у простейших ступенчатых многомодовых ВОСв (рис. 2*а*) сравнительно большой диаметр (50 – 200 мкм), что облегчает их стыковку друг

с другом и с некогерентными источниками излучения, однако вследствие большой межмодовой дисперсии они имеют значительно меньшую полосу пропускания, чем ступенчатые одномодовые или градиентные волоконные световоды.

Существенное влияние на передаточные характеристики ВОСв оказывают числовая апертура и длина волны используемого оптического сигнала, переносчика информации. Числовая апертура $A_0=(n_1^2-n_2^2)^{1/2}$ определяет критический угол полного внутреннего отражения $Q_K=\arcsin A_0$. От него зависят величина мощности вводимой в волоконный световод диффузных источников света, и, главное, величина межмодовой дисперсии, которая приводит к расширению импульсов и уменьшению полосы пропускания световода.

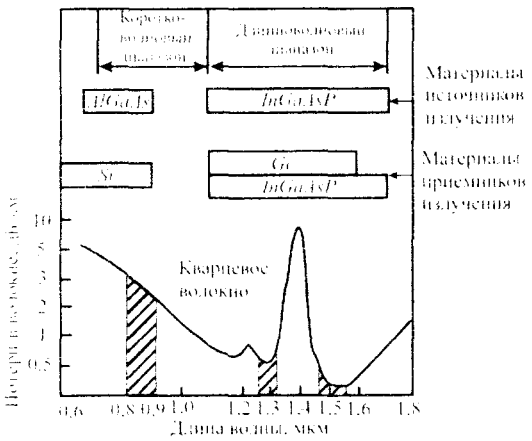


Рис. 3. Потери в кварцевом ВОСв и диапазоны применения материалов источников и приемников оптического излучения

Наиболее приемлемые диапазоны длин волн для кварцевых ВОСв представлены на рис. 3 (заштрихованные области). Как будет показано в дальнейшем, длина волны используемого света определяет не только величину потерь в ВОСв, но и ширину полосы пропускания волоконного световода, которая тем больше, чем больше длина волны.

Основные параметры ВОСв, применяемых в ОЭЛВС и местных линиях передачи данных, представлены в табл. 1 [3-5], содержание которой раскрывается ниже.

Таблица 1. Типы и параметры оптических волокон, применяемых в ОЭЛВС

Тип волокна		Длина волны, нм	Диаметр сердцевины, мкм	Числовая апертура	Ширина полосы, МГц·км	Затухание дБ/км
Кварцевое	Ступенчатое многомодовое	850-900	50-300	0,2-0,4	5-30	<10
	Градиентное многомодовое	800-900	50-200	0,2-0,3	100-500	3,0-5,0
		1300-1600			800-1000	0,7-2,0
	Градиентное многомодовое «утолщенное» для ОЭЛВС	1300-1600	62,5	0,275	200-1000	≤1,0
	Одномодовое	1300-1600	5-10	≤0,1	сотни ГГц·км	0,35
Кварц-полимерное		850-900	≤500	0,2-0,5	5-20	6-30
Полимерное		500-700	≤1000	0,5	5-60	200-500

1.2.3. Полоса пропускания волоконных световодов

Ширина полосы пропускания ВОСв определяет скорость передачи данных по физической линии, которая ограничивается расширением импульсов (дисперсией) в процессе их прохождения по волокну. Расширение импульсов вызвано тремя главными факторами:

– межмодовой (или модовой) дисперсией – разбросом в задержке различных мод (лучей, распространяющихся под разными углами к оси ВОСв);

– материальной дисперсией – нелинейной зависимостью коэффициента преломления материала волокна от частоты;

– волноводной дисперсией, связанной с волноводными свойствами ВОСв.

Два последних типа дисперсии имеют значение только для одномодовых волоконных световодов, их можно считать разновидностями хроматической дисперсии, вызывающей размывание импульсов, посылаемых некогерентными широкополосными источниками, такими, как светоизлучающие диоды (СИД). Кроме того, величина хроматической дисперсии при длине волны 1300 нм в 10-15 раз меньше, чем при длине волны 850 нм [9].

В ступенчатых многомодовых ВОСв межмодовая дисперсия, величина которой лежит в пределах от 15 до 50 нс/км, более чем на порядок превышает хроматическую дисперсию. Именно межмодовая дисперсия является основным ограничивающим фактором для полосы пропускания, независимо от длины волны и широкополосности источника излучения ширина полосы пропускания ступенчатых ВОСв не превышает 30 МГц·км. Поэтому многомодовые ступенчатые волокна, по-видимому, не найдут применения в общих каналах ОЭЛВС, но могут использоваться в абонентских интерфейсах последних.

Для выравнивания скоростей разных мод и снижения межмодовой дисперсии до 0,5 нс/км используются градиентные ВОСв. В этих световодах в случае применения СИД при малых длинах волн (800 – 900 им) ограничивающим фактором пропускной способности является материальная дисперсия (из-за широкой спектральной полосы излучения). Однако в области 1300 нм, где материальная дисперсия равна нулю, некогерентный и когерентный источники обеспечивают одну и ту же полосу пропускания, ограниченную лишь небольшой межмодовой дисперсией, поэтому ширина полосы пропускания градиентных ВОСв достигает 1 ГГц·км. Следовательно, в локальной сети на кварцевых ВОСв можно увеличить более чем в два раза пропускную способность путем замены СИД с длиной волны 850 нм на СИД с длиной волны 1300 нм, не меняя проложенные оптические кабели.

Стандартный размер многомодовых ВОСв $d_c/d_{об}$=50/125 мкм, где d_c и $d_{об}$ – соответственно диаметры сердцевины и оболочки волоконного световода. Однако с целью облегчения стыковки для ОЭЛВС могут быть использованы градиентные волокна с увеличенным (нестандартным) диаметром сердцевины. Например, фирма *OFS*, выпускает «утолщенные» градиентные волокна размером 62,5/125 мкм с увеличенной числовой апертурой A_0 – 0,29 для использования совместно с СИД на длине волны 1300 нм [10].

Одномодовые ВОСв обладают наибольшей полосой пропускания, что обусловлено следующими причинами:

– поскольку в волоконном световоде распространяется только одна, основная (осевая) мода, в нем совершенно отсутствует межмодовая, самая большая по величине, дисперсия. В этом случае преобладающей в области малых длин волн является материальная дисперсия, величина которой примерно в 10 раз больше волноводной. Поэтому не имеет смысла применять одномодовые ВОСв в коротковолновом диапазоне, их полоса будет сравнима с полосой более удобных для стыковки многомодовых градиентных волоконных световодов;

– за счет оптимизации профиля показателя преломления обеспечивается минимальная хроматическая дисперсия на длине волны 1300 нм. Например, фирма *OFS* также выпускает одномодовые волокна W-типа с двойной оболочкой (рис. 2). В этом волокне существует вторая оболочка с показателем преломления n_3, причем $n_1 > n_3 > n_2$, вследствие чего оба вида хроматической дисперсии (материальная и волноводная) примерно равны по величине, но противоположны по знаку, поэтому происходит их взаимная компенсация. В оптимизированных одномодовых ВОСв ширина полосы пропускания достигает десятков и даже сотен ГГц·км. Такая широкая полоса делает одномодовые волоконные световоды весьма перспективной средой для высокоскоростных ОЭЛВС. Малый диаметр серцевины ($d_c \leq 10$ мкм) затрудняет стыковку ВОСв, однако этот негативный фактор компенсируется тем, что одномодовые волоконные световоды позволяют решить еще ряд технических, и экономических проблем.

Благодаря широкой полосе пропускания можно упростить структуру управляющих протоколов ОЭЛВС, поскольку отпадает необходимость минимизировать объем управляющей или служебной информации в пакете данных.

Одномодовые ВОСв дают возможность применения в ОЭЛВС когерентных методов приема, при этом чувствительность приемных устройств может быть выше (примерно на 10-20 дБ) по сравнению с известным методом прямого детектирования [5].

Снижается стоимость ВОСв при увеличении объема производства. Поскольку диаметр сердцевины одномодового волоконного световода в 5-10 раз меньше диаметра сердцевины многомодового, объем сверхчистого материала уменьшается соответственно в 25-100 раз.

Перечисленные достоинства являются причиной непрерывного наращивания производства одномодовых ВОСв. В США, по данным фирмы *Corning Glass*, их доля в общем рынке волоконных световодов в 1996-2006 г. составила более 90% [11].

Что касается кварц-полимерных и полностью полимерных ВОСв, то по своей пропускной способности они относятся к классу многомодовых ступенчатых, т. е. узкополосных световодов. Их преимущество заключается в возможности получения большого диаметра сердцевины и большой апертуры с целью увеличения доли мощности, вводимой от некогерентных источников.

1.2.4. Затухание в волоконных световодах

Спектральная зависимость потерь в кварцевом ВОСв представлена на рис. 3. Потери в световоде определяются поглощением (зависит от чистоты материала) и рэлеевским рассеянием на молекулярных неоднородностях стекла. Последнее обратно пропорционально 4-й степени длины волны проходящего по волокну оптического сигнала, поэтому переход в длинноволновый диапазон 1300-1600 нм из хорошо освоенного коротковолнового диапазона 800-900 нм благоприятен не только с точки зрения увеличения полосы пропускания, но и с точки зрения уменьшения затухания. Затухание в ВОСв в наибольшей степени определяет расходную часть энергетического бюджета физической линии и непосредственно влияет на достоверность и/или дальность передачи информации.

При переходе на длину волны 1550 нм в кварцевых ВОСв достигнуто наименьшее затухание 0,14

дБ/км [7], но при этом уменьшается полоса пропускания, т. к. на этой длине естественная материальная дисперсия не равна нулю. Эта проблема решается путем сдвига нулевой дисперсии в диапазон 1550 нм за счет введения легирующих добавок (так называемые волокна со смещенной нулевой дисперсией).

Например, фирма *Philips* (Нидерланды) разработала одномодовый ВОСв со сглаженной дисперсией в диапазоне от 1285 до 1600 нм, которое можно использовать совместно с дешевыми, но излучающими широкий спектр частот СИД и тем самым строить экономичные ОЭЛВС. Ширина полосы пропускания этого ВОСв в два раза шире обычных одномодовых, что очень удобно при спектральном уплотнении каналов [12].

В будущем значительное снижение затухания в ВОСв возможно за счет перехода в диапазон длин волн 2000-4000 нм и использования другого материала. Например, волокна на основе фторидных стекол на длине волны 2500 нм по расчетам будут иметь затухание менее 0,02 дБ/км [4].

1.2.5. Проблема стоимости передающей среды

Стоимость является одним из важнейших критериев для массового применения ВОСв в ЛВС. На начальном этапе развития волоконно-оптической связи волокнные световоды по стоимости значительно превосходило металлические кабели, но благодаря прогрессу технологии и массовости производства цены на волокно значительно снизились. В 1985 г. многомодовое волокно продавалось по 450 долл./км, к 2007 году цена на него упала до 12 долл./км [13].

В настоящее время проблема стоимости актуальна главным образом в низкоскоростных сетях, поскольку для высокоскоростных сетей единственной приемлемой физической средой будут ВОСв. В низкоскоростных же сетях небольшой длины возможно применение витой пары.

Пластмассовые волокна имеют большое затухание (200-500 дБ/км), поэтому длина физических линий «разветвитель – узел» пока не превышает 80 м. При некоторых усовершенствованиях, включая уменьшение затухания волокна и повышение чувствительности приемника, можно надеяться на длины линии 100 м при семи узлах на разветвитель.

Таким образом, ВОСв в качестве физической среды ЛВС удовлетворяют настоящим и перспективным требованиям к пропускной способности и затуханию (кроме пластмассовых). В настоящее время пропускная способность волоконно-оптических линий ограничивается в большей степени быстродействием электронных узлов, а не характеристиками волоконных световодов [3].

2. Излучатели и передатчики

2.1. Требования

Передатчик – оптоэлектронная схема, которая преобразует электрический логический сигнал в эквивалентный оптический сигнал. Кроме обычных требований, предъявляемых к передатчикам любых волноводно-оптических систем (высокая выходная мощность и КПД, простота модуляции, эффективный ввод излучения в линию передачи и т. д.), передатчики для ОЭЛВС должны удовлетворять таким специфическим требованиям, как [15, 18]:

– широкий диапазон скоростей передачи без настройки схем;

– питание от +5 В для совместимости со стандартными микросхемами;

– высокая надежность, чтобы сохранить общую системную надежность при наличии большого количества передатчиков в сети;

– модульность построения, компактность, чтобы обеспечить возможность непосредственного монтажа модулей передатчика (и приемника) на печатных платах в условиях высокоплотной упаковки;

– минимум ограничений на выбор протоколов кодирования и формата передаваемых данных;

– работоспособность в широком диапазоне температур и разнообразных условиях окружающей среды;

– простота конструкции, низкая стоимость и легкость обслуживания, чтобы обеспечить успешную конкуренцию ОЭЛВС с электронными сетями.

2.2. Типы излучателей

Характеристики оптических передатчиков определяются главным образом типами используемых в них источников света – излучателей. В волноводно-оптических связных системах в настоящее время используются два типа полупроводниковых излучателей (рис. 4): светоизлучающие диоды (СИД) и лазерные диоды (ЛД). Излучение света в них происходит, когда электроны и дырки рекомбинируют при протекании тока накачки (10 – 150 мА) через *p-n*-переход в прямом направлении. На рис. 4*а* представлена структура СИД поверхностного типа, вывод излучения в котором осуществляется перпендикулярно плоскости *p-n*-перехода. В ЛД (рис. 4*б*) излучение всегда выводится из торца кристалла, параллельно плоскости перехода. По физической структуре и используемым материалам оба типа излучателей идентичны, принципиальная разница заключается лишь в том, что в ЛД имеется оптический резонатор (зеркалами которого служат сколотые грани полупроводникового кристалла), а в СИД такой резонатор отсутствует. Резонатор обеспечивает в ЛД положительную обратную связь, вследствие чего в них можно получить

стимулированное когерентное излучение большой плотности в ограниченном пространственном угле и узкой спектральной полосе при превышении определенного порога возбуждения. В СИД происходит спонтанное (диффузное) излучение света в широком телесном угле и широкой спектральной полосе. С точки зрения применимости в ОЭЛВС каждый из этих источников обладает рядом достоинств и недостатков.

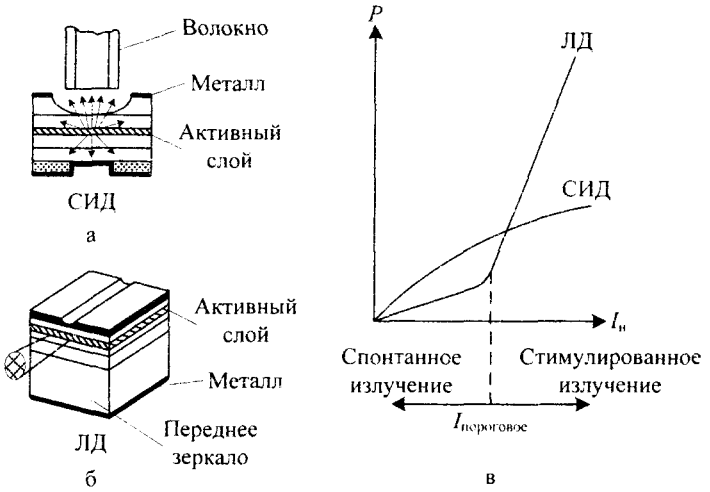


Рис.4. Типы источников излучения: *а* – поверхностно излучающий СИД; *б* – полосковый ЛД с двойной гетероструктурой; *в* – вольт-ваттные характеристики; P – выходная мощность; $I_н$ – ток накачки (возбуждения)

Оба типа излучателей изготавливаются на базе *AlGaAs* или гетероперехода *InGaAsP/InP*: первые – для работы в диапазоне длин волн 700 – 900 нм, вторые – в диапазоне 1100 – 1600 нм (рис. 3).

2.3. Сравнительный анализ характеристик СИД и ЛД [5, 6, 15, 16]

В зависимости от назначения, топологии, технических характеристик и экономических требований разработчик ОЭЛВС должен выбрать тот или иной тип источника излучения.

2.3.1. Мощность излучателя, вводимая в оптический волновод

Это очень важный для ОЭЛВС параметр излучателя, поскольку величина этой мощности (совместно с чувствительностью приемника) определяет энергетический потенциал физической линии, а значит, и достоверность передачи информации и/или расстояние между узлами, число подключаемых к сети узлов (абонентов), возможность обхода неисправных узлов и т. д.

При одном и том же токе накачки мощность излучения ЛД примерно на 10-20 дБ больше мощности СИД. В последнем из-за диффузного режима излучения генерируемая мощность меньше, чем в ЛД, и вследствие большой угловой расходимости мощность, вводимая в волокно, еще более снижается. В известных к настоящему времени проектах ОЭЛВС мощность предполагаемых к использованию СИД составляет 0,006 – 0,6 мВт, а ЛД, соответственно 0,2-6,3 мВт. Таким образом, по мощности ЛД имеет явное преимущество перед СИД. Следует заметить, что в ОЭЛВС планируется использовать далеко не самые лучшие по мощности излучатели. Имеются образцы излучателей того и иного типов, мощность которых в 5-10 раз выше названной, однако из-за дороговизны они непригодны для сетей массового применения.

2.3.2. Линейность ватт-амперной характеристики

Если зависимость мощности излучения СИД от тока накачки более или менее линейна (рис. 4*в*), то из-за порогового характера излучения эта характеристика у ЛД сугубо нелинейная (имеет резкий излом в области порога). Поэтому СИД можно использовать и для аналоговой и для цифровой передачи. В последнем случае их можно использовать, при работе с многоуровневыми кодами. У ЛД в этом отношении возможности ограничены, они могут использоваться только для передачи однополярных импульсов.

2.3.3. Стабильность выходной мощности

В ЛД величина порога и уровень излучаемой мощности в надпороговом режиме из-за крутого хода ватт-амперной характеристики очень сильно зависит от температуры, колебаний тока накачки и различных временных нестабильностей. Стабилизацию выходной мощности можно осуществлять при помощи оптической обратной связи через дополнительный фотодиод-приемник. Это усложняет схему возбуждения и требует, кроме того, отсутствия в спектре модулирующего сигнала НЧ-составляющих, т. е. накладывает определенные ограничения на выбор кода.

2.3.4. Быстродействие (скорость модуляции)

ЛД принципиально обладают более высоким быстродействием, чем СИД. Связано это с меньшим временем жизни неосновных носителей вследствие процесса вынужденного когерентного излучения. Скоро-

сти передачи информации в известных волоконно-оптических сетях с применением ЛД находятся в пределах 1-10 Гбит/с, тогда как в сетях на основе СИД диапазон скоростей составляет 2-128 Мбит/с. Несмотря на рост предельных скоростей модуляции обоих типов источников, эта характеристика лазера всегда выше.

2.3.5. Ширина спектральной линии излучения

Скорость передачи информации в физической линии ограничивается дисперсией импульсов в оптическом волноводе, в том числе материальной дисперсией, величина которой зависит от ширины спектра оптического сигнала. ЛД принципиально имеет более узкую спектральную полосу излучения (<5 нм), чем СИД (30 – 200 нм), поэтому ЛД допускает более высокие скорости передачи. Следует отметить, однако, что в диапазоне длин волн 1300 нм хроматическая дисперсия кварцевого ВОСв очень мала, поэтому ширина спектральной линии, т. е. тип излучателя, не влияет на скорость передачи информации.

2.3.6. Температурный режим работы

Передатчик на ЛД нуждается в термоэлектрическом холодильнике для поддержания температуры излучателя на уровне 20-25°С, так как при повышении температуры надежность лазера падает. Кроме того, нагрев повышает порог лазерной генерации, затрудняя тем самым возбуждение и снижая выходную мощность. Требования к температурному режиму СИД значительно менее жесткие.

2.3.7. Надежность

По надежности ЛД существенно уступает СИД и обусловлено это лазерным (вынужденным, надпороговым) характером его излучения. Благодаря полосковой двойной гетероструктуре генерация происходит в пространственно-ограниченном активном слое ЛД, в результате чего излучается узконаправленный пучок фотонов большой плотности. Высокая плотность электронов и фотонов в активном волноводном канале приводит к деградации материала, особенно зеркал резонатора, к возникновению и быстрому росту безызлучательных центров и катастрофическому снижению выходной мощности ЛД в процессе работы.

У ЛД достигнут срок службы 10^5-10^6 ч (для ЛД, используемых в высоконадежных подводных связных магистралях, λ =1300 нм), у СИД срок службы находится в диапазоне от 10^6 ч (λ =850 нм) до 10^9 ч (λ =1300 нм). Таким образом, по надежности СИД имеет существенное преимущество перед ЛД.

2.3.8. Стоимость

Сложность выращивания кристаллов и формирования необходимых излучающих структур лазеров приводит к существенному различию стоимости ЛД и СИД. По стоимости СИД имеет явное преимущество перед ЛД.

2.3.9. Ограничения на выбор кода

Прежде всего, следует отметить, что оба типа источников в силу особенностей оптического излучения могут использовать для модуляции только однополярные сигналы. При цифровой передаче ЛД накладывает некоторые ограничения на применяемые коды:

– практически невозможно использовать многоуровневые кодовые сигналы;

– необходимо использовать сигналы с малым содержанием НЧ-компонент, чтобы дать возможность стабилизировать выходную мощность диода.

Таким образом, сравнение СИД и ЛД по основным параметрам показывает, что СИД имеет преимущества перед ЛД. Нельзя, конечно, истолковывать этот количественный факт как признак подавляющего преимущества СИД при использовании в ОЭЛВС. В каждом конкретном случае весовой коэффициент того или иного параметра может превышать все остальные, но вместе с тем изложенные выше соображения свидетельствуют о возможностях широкого применения СИД.

2.3.10. Перспективы широкого применения СИД в ОЭЛВС

Можно указать несколько причин широкого применения СИД в настоящее время и в будущем:

– высокая надежность, дешевизна, простота устройства и эксплуатации – качества СИД, особенно необходимые для ОЭЛВС массового применения в условиях конкуренции с электронными ЛВС;

– наличие довольно большого класса низкоскоростных ЛВС, для которых существующие СИД подходят по быстродействию и мощности. К ним относятся сети для персональных компьютеров, микро-ЭВМ, производственные сети и др.;

– идет интенсивный процесс совершенствования СИД с целью их более широкого применения в высокоскоростных локальных сетях. Можно выделить несколько направлений развития СИД: переход в диапазон волн 1300-1600 нм, где кварцевые ВОСв имеют наименьшее затухание (меньше требования к мощности излучения СИД); разработка новых структур (СИД торцевого типа), позволяющих увеличить мощность излучения и эффективность ввода излучения в волокно. В существующих СИД поверхностного типа излучение выходит через протравленное в поверхности подложки окно и имеет большой угол расхождения. В СИД новой структуры излучение из активного слоя выходит через торец полупроводникового кристалла (как в ЛД) с большей мощностью и меньшей расходимостью;

– увеличение скорости модуляции в диодах с поверхностным излучением за счет сильного легирования активной области. Однако при этом может увеличиться концентрация центров безызлучатель-

ной рекомбинации, что приводит к падению выходной мощности;

– интеграция оптоэлектронных компонентов с целью уменьшения размеров, повышения надежности, работоспособности на высоких скоростях и снижения их стоимости.

Таким образом, СИД имеют весьма реальную перспективу массового применения в широком классе ОЭЛВС.

3. Фотодетекторы и приемники

3.1. Требования

Приемник – оптоэлектронная схема, преобразующая оптический сигнал в электрический логический сигнал.

Приемник состоит из фотодетектора, усилителя и устройства обработки сигнала (рис. 5*а*). Наличие усилителя обусловлено тем, что при передаче сигнала по оптическому тракту физической линии от передатчика к приемнику происходит ослабление (и искажение) сигнала. В большинстве случаев ток, создаваемый оптоэлектронным преобразователем – фотодетектором, очень мал (наноамперы), поэтому необходимо усиление сигнала.

Основные требования к оптическому приемнику ОЭЛВС: максимальная чувствительность, неискаженная демодуляция и большой динамический диапазон. Последнее требование обусловлено тем, что в ОЭЛВС приемник может получать сигнал, как от близко, так и далеко расположенных станций. Все другие требования к приемникам, касающиеся напряжения питания, габаритов, стоимости и т. д. те же самые, что и к передатчикам.

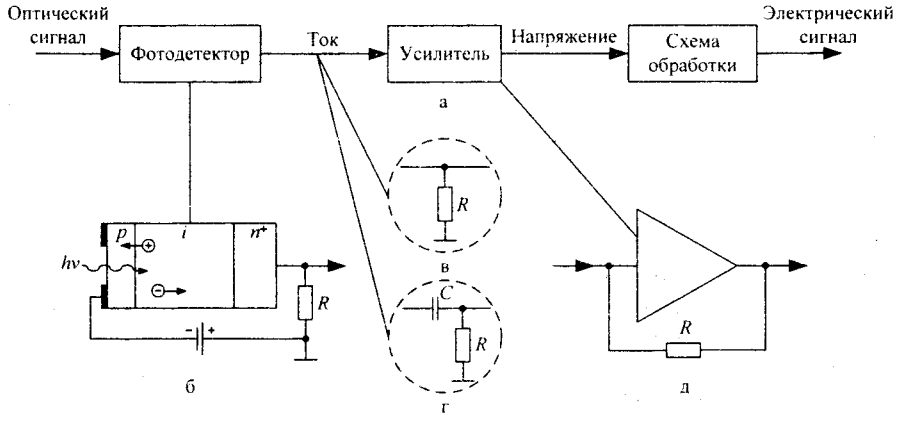


Рис. 5. Оптический приемник ОЭЛВС: *а* – структурная схема, *б* – связь по постоянному току, *г* – связь по переменному току, *д* – трансимпедансный усилитель

Если в оптических передатчиках ключевым является один элемент – излучатель, то характеристики оптического приемника определяют три основных фактора: тип фотодетектора, характер связи фотодетектора с усилителем, шумовые свойства усилителя, обусловленные составом элементов и схемой усиления (т. е. типом предусилителя).

3.2. Типы фотодетекторов

В основе детектирования света лежит преобразование энергии фотонов в электрический ток, которое осуществляется с помощью фотодиодов (ФД). В волноводно-оптических системах связи для детектирования света используется внутренний фотоэффект – образование подвижных носителей заряда в полупроводниках при поглощении света. ФД представляет собой обратно смещенный $p-n$ -переход, способный поглощать падающее оптическое излучение. Электронно-дырочные пары, образовавшиеся в результате поглощения фотонов, дрейфуют под действием приложенного напряжения смещения и возбуждают ток во внешней цепи. На рис. 5*б* представлена структура *pin* -ФД с тонким *p*-слоем, через который свет проникает в *i*-область. Достаточно высокое напряжение обратного смещения (5 – 10 В) вынуждает носители зарядов двигаться в обе стороны, поэтому сила тока пропорциональна падающему свету.

В фотодетекторах применяются такие полупроводниковые материалы, как кремний (для коротких волн) и германий или трехкомпонентные соединения *InGaAs* на фосфидиндиевой подложке (*InGaAs/InP*) для более длинных волн (рис. 3).

В настоящее время в волноводно-оптических системах применяются ФД двух типов: *pin* -ФД и лавинные (ЛФД). Различие между ними состоит в следующем. В *pin* -ФД на каждый поглощенный фотон рождается не более одной электронно-дырочной пары (1 Вт мощности оптического излучения генерирует ток приблизи-

тельно 0,5 – 0,7 А). В ЛФД за счет лавинного умножения на каждый поглощенный фотон рождается более одной электронно-дырочной пары, поэтому коэффициент преобразования может возрасти до 50 А/Вт.

Для возникновения лавинного эффекта в ФД требуется значительно повысить напряжения смещения (до 300 В) и создать в приборе сложную структуру чередующихся слоев полупроводника с различной проводимостью. Производство ЛФД требует также особых мер, обеспечивающих равномерный лавинный режим по всей площади диода и отсутствие локальных дефектов и искажений (особенно опасны в этом отношении края). Следовательно, устройство и изготовление ЛФД более сложные, и он в итоге дороже, чем *pin* -ФД.

Более того, процесс лавинного умножения в ЛФД является статистическим, т. е. каждый первичный носитель заряда создает случайное число вторичных носителей, вследствие чего в усилительный процесс вносится добавочный шум. К тому же коэффициент лавинного умножения зависит как от величины приложенного напряжения, так и от температуры диода. Чтобы сделать коэффициент умножения более постоянным, необходимо прибегать к температурной стабилизации и стабилизации питающего напряжения.

При выборе фотодетектора для ОЭЛВС необходимо иметь ввиду следующее:

– наиболее отработаны, дешевы и имеют почти идеальные характеристики в полосе пропускания до 6 ГГц и более, кремниевые *pin* -ФД, работающие на длинах волн 800 – 900 нм. Но в этом диапазоне хроматическая дисперсия в ВОСв ограничивает скорость передачи при использовании СИД, а затухание в световоде больше, чем в диапазоне 1300 – 1600 нм. Поэтому кремниевые ФД рекомендуется использовать в низкоскоростных ОЭЛВС;

– ЛФД имеют много недостатков по сравнению с *pin* -ФД, единственным преимуществом ЛФД является более высокая чувствительность. Под чувствительностью приемника обычно понимают минимальный выходной сигнал $P_{пр}$ три заданном коэффициенте ошибки (стандартное требование 10^{-9}). Эта мощность зависит только от двух параметров, квантовой эффективности и уровня шумов, т. е. от фотодетектора и усилителя. Поскольку в современных фотодетекторах квантовая эффективность близка к теоретическому пределу, то именно уровень шумов определяет чувствительность приемника. В известных оптических связных системах приемники на основе ЛФД обеспечивают чувствительность до $3{,}3\cdot10^{-5}$ мВт, на основе *pin* -ФД – до $2\cdot10^{-4}$ мВт [3, 4]. ЛФД, коэффициент шума, которого чаще всего превышает коэффициент шума последующего электронного усилителя, позволяет улучшить чувствительность оптических приемников [14-17]. Основными составляющими шума в оптическом приемнике являются дробовой (квантовый) шум оптического информационного сигнала, дробовой шум темнового тока фотодетектора и тепловой шум усилителя. Эти составляющие имеют различную энергетическую плотность: тепловой шум усилителя на 1-3 порядка превышает дробовой шум сигнала и фотодетектора. Если используется *pin* -ФД, то преобладающим в приемнике является тепловой шум усилителя, имеющий наибольшую энергетическую плотность, он ограничивает чувствительность приемника (хороший усилитель на полевых транзисторах имеет коэффициент шума F_y=5 дБ);

– при использовании ЛФД с коэффициентом умножения M за счет статистического процесса лавинного умножения коэффициент шума $F_\phi \approx M^x$, где x=0,2 – 1,0. Существуют оптимальные значения коэффициента умножения M, при котором достигается главная задача приемника – превышение дробовых шумов ФД тепловых шумов усилителя. Величина оптимального коэффициента умножения в различных ЛФД колеблется от 15 до 70. При этом коэффициент шума лежит в диапазоне 3-15 дБ. Несмотря на вносимый умножителем дополнительный шум, ограничивающим теперь является дробовой шум ЛФД, энергетическая плотность которого, выше на 1-3 порядка и меньше энергетической плотности тепловых шумов усилителя. Отсюда и улучшение чувствительности приемников на основе ЛФД. Однако ЛФД несовместимы по питанию со стандартными микросхемами, имеют высокую стоимость, требуют температурной стабилизации, поэтому их применение оправдано только в тех случаях, когда требуется обеспечить достаточную чувствительность при наличии больших потерь в длинных оптических трактах ОЭЛВС;

– весьма перспективными для ОЭЛВС являются фотодиоды (*pin* -ФД и ЛФД) диапазона длин волн 1300 – 1600 нм на основе соединений *InGaAs/InP*, поскольку в этом диапазоне оптические волноводы имеют наименьшее затухание и наибольшую скорость передачи при использовании дешевых и надежных некогерентных источников излучения – СИД.

Снижение стоимости и габаритов, а также обеспечение высокой надежности фотоприемников и повышение скорости передачи информации в этом диапазоне, может быть реализовано путем конструктивно-технологического объединения всех элементов приемника (фотодетектора, усилителя и демодулятора) в одно интегральное оптоэлектронное устройство.

3.2.1. Связь между фотодетектором и усилителем

Характер этой связи влияет на искажения сигнала в приемнике, на чувствительность, динамический диапазон и, как следствие, на протоколы кодирования (формат кадров и тип кода). По этому признаку оптические приемники классифицируются на приемники со связью по постоянному току (рис. 5*в*)

и со связью по переменному току (рис. 5*г*).

3.2.1.1. Приемники со связью по постоянному току реагируют на сигналы любого формата (как постоянные, так и переменные), частота которых ограничивается верхней частотой их полосы пропускания. Отсутствие переходных конденсаторов между фотодетектором и усилителем повышает быстродействие приемника и упрощает структуру цепи, благоприятствуя тем самым изготовлению приемника в виде интегральной схемы. Однако приемник этого типа имеет следующие недостатки:

– искажение длительности выходных импульсов после компаратора (в цифровых приемниках в качестве демодулятора или схемы решений обычно используется компаратор) при изменении уровня входного сигнала, если порог компаратора настроен, как это имеет место на практике, на постоянный минимум сигнала. Искажение длительности импульсов, в конечном счете, ограничивает скорость передачи и динамический диапазон принимаемого сигнала;

– случайные смещения порогового уровня компаратора из-за температурных дрейфов или изменения питающих напряжений, что приводит к ухудшению помехоустойчивости из-за не оптимальности порога обнаружения. Впрочем, этот недостаток в известной мере можно устранить, имея наряду с отрицательным и положительное опорное напряжение, но это, естественно, усложняет конструкцию приемника и блока питания.

3.2.1.2. В приемнике со связью по переменному току в цепи между фотодетектором и усилителем устанавливается конденсатор, который вместе с нагрузочным сопротивлением образует *RC*-цепь (фильтр верхних частот). Форма выходного напряжения на выходе *RC*-цепи при действии прямоугольного импульса длительностью $t_и$, как известно, зависит от соотношения между $t_и$ и постоянной времени $T_в=RC$.

При $RC>>t_и$ за время действия импульса напряжение на конденсаторе не успевает существенно измениться и выходной импульс мало отличается от входного. Такая цепь называется переходной, она используется, например, для того, чтобы отделить постоянную составляющую при усилении или преобразовании импульсов. Кроме возможности безыскаженной передачи импульсов при определенных условиях такой приемник имеет более высокий динамический диапазон и более высокую чувствительность.

Но в этом приемнике не исключена возможность появления межсимвольной интерференции и связанных с ней нежелательных эффектов. Поскольку полоса пропускания приемника ограничена (главным образом снизу), при передаче импульсных сигналов из-за несогласованности характеристик возможен НЧ-срез спектра сигнала и, как следствие, появление длинных хвостов импульсов вне рабочего такта и наложение их на соседние импульсы (межсимвольная помеха), что приводит к искажению импульсов и необходимости снижения скорости передачи.

Кроме того, эффект наложения длинных хвостов вызывает смещение нулевого уровня, положение которого относительно порога обнаружения зависит от того, в какой последовательности поступают «1» или «0» в пакете данных. Для стабилизации нулевого уровня необходимо наложить определенные ограничения на код в линии или установить последовательность «1» и «0», при которой достигается приблизительный баланс этих сигналов. Далее, при пакетной передаче данных необходимо либо заполнять паузы между пакетами передачей «пустых» символов, либо передавать длинную установочную последовательность в начале пакета, чтобы избежать пропуска нескольких первых битов информации в пакете.

Таким образом, приемник со связью по переменному току при $RC>>t_и$ налагает определенные требования к коду в линии и режиму передачи данных.

Гораздо более гибкой системой, допускающей любой рабочий цикл (от непрерывной последовательности «1» до непрерывной последовательности «0»), является приемник, у которого $RC<<t_и$, именуемый иногда как *приемник со связью по фронтам сигнала*. Цепью связи в таком приемнике пропускаются только фронты импульсов, происходит операция дифференцирования. Фронты импульсов проходят с уменьшенной амплитудой и до прихода следующего фронта цепь связи успевает полностью разрядиться. Поскольку продифференцированные фронты приходят к опорному уровню с разных сторон, то необходим амплитудный детектор с двумя порогами, один из которых выше опорного напряжения, а другой – ниже (по существу этот детектор является триггером Шмидта). Дифференцирование влияет на отношение сигнал/шум, ухудшая его. Экспериментально найдено, что потери при дифференцировании составляют 8,2 дБ [16]. Однако потеря чувствительности компенсируется преимуществом неизменного положения нулевой линии при разных рабочих циклах.

Следовательно, приемник со связью по фронтам сигнала не накладывает каких-либо ограничений на формат данных и длину последовательностей «1» или «0», а также не требует заполнения пауз между пакетами. Кроме того, при его применении расширения импульсов при изменении уровня входного потока не наблюдается. Однако за эти преимущества приходится расплачиваться снижением чувствительности приема на 8,2 дБ.

В ОЭЛВС вследствие простоты и дешевизны наиболее перспективны приемники, имеющие связь между фотодетектором и усилителем по переменному току, однако находят применение и приемники со связью по постоянному току.

3.3. Типы усилителей

Схема усилителя, его элементная база влияют на шумовые характеристики, а значит, и чувствительность приемника. Шум в приемнике будет минимальным, если входное сопротивление предварительных каскадов усилителя будет выбрано большим. Но при этом нужно получить необходимый динамический диапазон. В волноводно-оптических приемниках используются две основные схемы усилителей: высокоимпедансная и трансимпедансная [7, 18].

3.3.1. Усилитель с высоким входным импедансом

Самым низким уровнем шумов обладают усилители с высоким входным импедансом; в этом случае выходной сигнал фотодетектора интегрируется высоким входным импедансом усилителя, а затем, уже имея большую амплитуду, дифференцируется корректирующим каскадом. Преобладающий характер шума и его величина зависят от электронной элементной базы усилителя.

Усилитель на полевом транзисторе имеет очень большое входное сопротивление, поэтому доминирующим является тепловой шум, среднеквадратичное шумовое напряжение которого пропорционально третьей степени полосы пропускания B.

На частотах свыше 50 МГц усилитель на кремниевых полевых транзисторах не обладает достаточным усилением, поэтому во входных каскадах используются биполярные транзисторы, преобладающим шумом в которых является дробовой шум тока базы, а полный выходной шум оказывается пропорциональным B^2 [15].

Приемники с высокоимпедансным усилителем обладают низким уровнем шумов. Однако, если последовательности «1» и «0» в сигнале длительны, а уровень сигнала на входе приемника непостоянен, что характерно для реальных систем, то нельзя использовать усилители с высоким входным импедансом, так как возникающие низкочастотные компоненты выходного тока детектора обладают большой амплитудой и сигнал на входном сопротивлении усилителя становится слишком большим.

3.3.2. Усилитель трансимпедансного типа

Избежать перенасыщения при больших уровнях сигнала позволяет усилитель трансимпедансного типа (рис. 5*б*). Наиболее важным параметром, который заставляет принимать компромиссные решения при проектировании приемников, является динамический диапазон. В реальных линиях должен быть обеспечен прием не только минимально обнаружимых сигналов, но и сигналов с большой амплитудой, что является неотъемлемой особенностью ОЭЛВС. Обеспечение же широкого динамического диапазона предъявляет жесткие требования к характеристикам усилителя, следующего за детектором оптического излучения.

Трансимпедансный усилитель – это, по существу, усилитель с большим коэффициентом усиления и высоким входным импедансом, охваченный обратной связью. Поэтому он обеспечивает низкий уровень шумов при широком динамическом диапазоне.

3.4. Оптические соединители [3]

ОЭЛВС является сетями, которые имеют интерфейс «человек – машина», поскольку соединяют в основном терминалы, за которыми работают люди. При эксплуатации таких сетей неизбежными являются перестановки, включения и выключения терминалов из сети, которые будут осуществляться с помощью оптических соединителей. Численность оптических соединителей превосходит численность всех других компонентов сети.

Отсюда вытекают и требования к оптическим соединителям: простота, удобство в эксплуатации, надежность соединений, дешевизна, малые габариты и потери, способность работать в различных условиях окружающей среды, возможность многократных подключений без заметного ухудшения качества.

Приемопередатчики ОЭЛВС должны подключаются к тракту физической линии при помощи разъемных оптических соединителей. Для того чтобы реализовать надежное, компактное и легкое соединение, были разработаны конструкции быстроразъемных соединителей, в которых соединение осуществляется благодаря трению.

4. Протоколы физического уровня

4.1. Взаимосвязь синхронизации и кодирования в локальных сетях

Протоколы физического уровня осуществляют кодирование и декодирование двоичной информации, а также обеспечивают синхронизацию входящих и исходящих кодированных временных сигналов при передаче информации по физической линии между станциями локальной сети [8].

Необходимость операций синхронизации и кодирования обусловлена следующими обстоятельствами. В ЛВС информация передается между вычислительными устройствами, в которых для внутреннего представления используются элементарные сигналы, принимающие лишь два значения, тождественные двоичным цифрам «0» и «1». Единица представляется наличием импульса, нуль – его отсутствием.

Для обмена информацией между устройствами сети они должны уметь оповещать друг друга о своей готовности к передаче или приему данных. Если они производят обмен данными, должен существовать способ информирования приемника о точном времени прохождения по линии связи каждого двоичного «0» и «1». В системах передачи это информирование осуществляется с помощью «общих часов»

– процедуры *синхронизации*, являющейся частью протокола связи и осуществляемой с помощью синхросигналов. Синхросигналы выполняют две важные функции. Они синхронизируют, настраивают приемник на передаваемое сообщение еще до того, как оно фактически приходит, и поддерживают синхронизацию приемника с входящими битами данных с целью выполнения операций для принятия решения о наличии или отсутствии сигнала на каждом тактовом интервале.

С этой точки зрения передача данных между вычислительными устройствами ОЭЛВС в их естественном виде, т. е. в коде *NRZ* (*nonreturn-to-zero* – без возвращения к нулю), исключая экономически неприемлемый вариант передачи синхросигнала по дополнительной линии, может иметь следующие недостатки:

– если «0» и «1» равновероятны, то не исключено появление подряд N идентичных символов с вероятностью 2^{-N}. Пусть N=10, тогда при больших объемах передаваемой информации такое событие будет проходить через случайные промежутки времени. Но ряд из десяти идентичных посылок не содержит временной информации, поэтому для исключения ошибок необходима высокостабильная схема синхронизации. При этом не только усложняется приемник, но и замедляется скорость обмена данными, т. к. при апериодическом режиме передачи, характерном для ЛВС, увеличивается время вхождения в синхронизм высокостабильной схемы синхронизации;

– в оптических сетях, где возможно использование только униполярных импульсов, длительная передача «1» или «0» вызывает изменение уровня постоянной составляющей. Это создает дополнительные трудности, связанные с изменением рабочей точки усилителя и возникающими при этом искажениями импульсов, с невозможностью поддерживать в схеме решения оптимального порога обнаружения и снижением в итоге достоверности передачи информации;

– различие между «0» и «1» заложено в уровне сигнала, который больше всех других параметров подвержен влиянию различных помех.

Таким образом, естественный для электронных вычислительных устройств *NRZ*-код непригоден для передачи данных между станциями ОЭЛВС, поскольку не обеспечивает синхронизацию приемника с приходящими битами информации.

Каким образом можно избежать потерь синхронизации при передаче данных между устройствами сети, не используя отдельный канал синхронизации? Суть применяемых для этого способов заключается в том, что путем полного или частичного преобразования исходного информационного сигнала либо устраняются длинные последовательности идентичных символов, либо временная настройка (синхроимпульсы) вводится в информационный сигнал, который в результате становится самосинхронизирующимся сигналом. Встраивание синхроимпульсов в информационный сигнал с точки зрения теории связи не что иное, как *временное уплотнение* двух каналов – информационного и синхронизации, которое неизбежно требует увеличения пропускной способности уплотненного канала.

Известны следующие способы такого хронирования передаваемой информации:

– скремблирование сигнала (*scrambling* – шифрование путем перестановки и инвертирования групп символов) или рандомизация. Чтобы устранить длинные последовательности нулей и единиц, информацию пропускают через специальное устройство (регистр сдвига) на передающей стороне и восстанавливающее устройство в приемнике [19]. При этом нужно учитывать недостаток скремблирования – сохранение с некоторой вероятностью экстремальных статистических ситуаций. Поэтому скремблирование иногда используют не самостоятельно, а как дополнение к кодированию;

– неалфавитное кодирование, при котором изменение статистических свойств исходной двоичной информации происходит (при сохранении ее тактовой частоты) только при определенных условиях – заданном количестве непрерывных нулей или единиц двоичной информации. Однако при неалфавитном кодировании остается все тот же *NRZ*-сигнал (но без длинных последовательностей нулей или единиц) со всеми присущими ему недостатками, в частности трудностью обнаружения и исправления ошибок;

– алфавитное кодирование, при котором последовательности двоичных символов исходной информации делятся на группы (блоки) с постоянным числом символов и затем преобразуются по определенному алфавиту в группы символов нового кода с новым числом символов m, преимущественно с большим количеством новых символов ($n>m$) в группе. Алфавитное кодирование характеризуется избыточностью преобразования двоичной информации, но за счет этого в самосинхронизирующемся коде можно получить некоторые свойства, полезные для улучшения помехоустойчивости передачи информации. По этой причине, по-видимому, наибольшее применение в ОЭЛВС найдет алфавитное кодирование.

4.2. Требования к кодам ОЭЛВС

При выборе кода для ОЭЛВС приходится учитывать несколько факторов, характеризующих его помехоустойчивость, способность к синхронизации, простоту реализации и дешевизну кодирующих устройств.

Основные требования, которые предъявляются при выборе кода передачи для ОЭЛВС, могут быть сформулированы следующим образом:

– в общем случае от кодов требуется бит-последовательная независимость, означающая, что код не должен налагать каких-либо ограничений на передаваемое сообщение и обеспечивать однозначность декодирования;

– код в линии должен содержать информацию о тактовой частоте передаваемого сигнала, чтоб обеспечить надежную синхронизацию приемников в процессе обработки принятого сигнала. Это требование удовлетворяется, если в линейном сигнале будут отсутствовать длинные последовательности одинаковых символов, что равнозначно наличию достаточного числа переходов (смен уровней) в сигнале;

– энергетический спектр кодированного сигнала должен быть узким и иметь минимальное содержание НЧ- и ВЧ-компонент, т. е. должен быть ограничен сверху и снизу. Узкополосность кода позволяет, с одной стороны, передавать сообщения путем использования узкополосных волноводно-оптических трактов, например, на основе простых многомодовых волоконно-оптических световодов, а с другой стороны, за счет сужения полосы пропускания приемника уменьшить вредное влияние шума. Ограничение спектра в области нижних частот вызвано требованием приема без искажений импульсных сигналов приемником со связью по переменному току, более простым (с точки зрения стабильности и числа питающих напряжений) и чувствительным, чем приемник со связью по постоянному току. В противном случае для реализации условий оптимального приема перед схемой решения приемника необходимо вводить дополнительную схему для восстановления НЧ-составляющей, что усложняет оборудование линейного тракта и увеличивает его стоимость. Существует еще одна причина для уменьшения уровня НЧ-составляющих спектра – необходимость стабилизации мощности излучения при использовании в передатчике лазерных диодов. Уровень мощности можно стабилизировать введением отрицательной обратной связи по среднему значению излучаемой мощности только в том случае, когда отсутствует НЧ-составляющая спектра, изменяющаяся во времени под действием информационного сигнала. В ином случае в цепи обратной связи должно быть предусмотрено специальное устройство, компенсирующее эти изменения, что приводит к усложнению и удорожанию оптического передатчика. Аналогичная ситуация возникает с АРУ приемника. Для оптических систем, где передача осуществляется только однополярными импульсами, требование ограничения НЧ-составляющей в спектре линейного сигнала означает, что необходимо выбирать такой код в линии, который обеспечивал бы неизменный уровень постоянной составляющей для любого соотношения числа нулей и единиц в информационном сигнале;

– выбранный код должен обеспечивать гарантированную достоверность передачи информации при заданных условиях приема. Достоверность передачи определяется потенциальной помехоустойчивостью кода и его способностью обнаруживать и исправлять ошибки. Помехоустойчивость, как известно, определяет минимальную среднюю мощность сигнала на входе приемника, обеспечивающую заданную вероятность ошибки на фоне принципиально неустранимых помех. С этим параметром тесно связана устойчивость к межсимвольной интерференции первого и второго порядка (из-за ограничений энергетического спектра в диапазоне высоких или низких частот). Структура кодовых символов, различимость элементарных сигналов кода должны быть такими, чтобы обеспечить заданную вероятность ошибки при наименьшем отношении сигнал/шум, т. е. поднять как можно выше вероятность безошибочной передачи. Свойство кода обнаруживать и исправлять ошибки называется помехозащищенностью. Выбранный код должен обеспечивать обнаружение и исправление неизбежно возникающих при передаче ошибок того или иного типа. Здесь главную роль будет играть структурная избыточность кода. Например, обнаружение всех одиночных или нечетных ошибок можно осуществить за счет контроля четности при добавлении дополнительных символов к каждому кодовому слову;

– увеличение скорости передачи битов в процессе кодирования (следовательно, расширение полосы пропускания системы) должно быть в принципе незначительным (там, где это параметр является критичным). Внесение дополнительных бит в информационное сообщение приводит к тому, что входное и выходное сообщения могут быть различной длины (закодированное сообщение обычно длиннее входного за счет введения дополнительных бит). Поэтому необходимо увеличение технической (физической) скорости передачи битов в линии передачи, чтобы за то же время (равное длительности информационного сообщения) передать большое количество битов. Сами по себе оптические волноводы достаточно широкополосны и могут допускать высокие скорости передачи информации, поэтому это требование для низкоскоростных ОЭЛВС не является лимитирующим. Однако в ОЭЛВС возможна перспектива увеличения скорости передачи данных; кроме того, в физической линии помимо оптического волновода задействованы оптоэлектронные и электронные компоненты, как правило, более низкоскоростные, чем волновод, поэтому надо быть внимательным при выборе кода по этому критерию;

– код должен наилучшим образом обеспечивать совместимость с передающей средой – оптическими волноводами: форма импульсов и их энергетический спектр должны соответствовать передаточным характеристикам оптического волновода; поскольку импульсы излучаемой оптической мощности только положительные, можно использовать лишь однополярные коды; ввиду нелинейности модуляци-

онных характеристик лазерных излучателей код в линии должен иметь минимальное число уровней; наиболее целесообразным для оптической передачи является двухуровневый код.

– схемная реализация выбранного протокола кодирования должна быть простой, кодирующие и декодирующие устройства должны быть дешевыми и надежными, что особенно важно в ОЭЛВС массового применения.

4.3. Оценка и сравнения кодов [20-22]

При выборе кода для ОЭЛВС возникает проблема оценки и сравнения различных кодов. Для этой цели предлагаются к использованию следующие критерии.

4.3.1. Эффективность

При алфавитном кодировании входной и выходной сигналы, как правило, бывают различной «длины». За счет введения дополнительных кодовых символов, позволяющих придать сигналу определенные свойства, код в линии «длиннее» входного сигнала. В результате наблюдается уменьшение эффективности, так как в тракт поступают символы, в которых нет прямой необходимости для передачи входящей информации. Если входной и выходной сигналы двоичные, как это может иметь место в ОЭЛВС, то эффективность определяется как отношение числа символов на входе m и выходе n преобразователя кода:

$$E = m/n = F_и / F_л ,$$

где $F_и$ и $F_л$ – тактовые частоты исходного сигнала на входе кодера и линейного сигнала на выходе кодера соответственно.

Коэффициент K – величина, обратная эффективности E, является отношением увеличенной технической скорости передачи в линии R в результате кодирования к информационной скорости $R_и$ (в коде *NRZ*)

$$K = 1/E = R/R_и = F_л / F_и = n/m .$$

4.3.2. Избыточность

Избыточность – мера «неиспользуемого» количества информации в кодах, эффективность которых отличается от 100%. Избыточность связана с эффективностью следующим соотношением:

$$y = 1/E - 1 .$$

Термин «неиспользуемый» употребляется в узком смысле как сигнал, не несущий полезной информации. На самом деле избыточность используется для совершенствования канала передачи. Вероятность ошибки, например, уменьшается, если точно восстанавливать синхронизацию сигнала в приемнике за счет введения хронирующей (избыточной) информации, за счет избыточности можно получить информацию о появлении ошибок, избыточность позволяет упросить каналообразующую аппаратуру и т. д.

4.3.3. Ширина спектра сигнала

В правильно сконструированной системе полоса пропускания линии передачи (излучатель, волоконный световод и особенно приемник) должна оптимальным образом соответствовать энергетическому спектру линейного сигнала. Слишком узкая полоса приведет к искажению импульсов, а слишком широкая – к нежелательному увеличению шума.

Ширина полосы сигнала (при 90% энергии в ней) определяется как

$$F = A_к / T_и ,$$

где $A_к$ – коэффициент, зависящий от вида линейного кода, а $T_и$=1/$F_и$ – длительность тактового интервала исходного информационного двоичного сигнала. Например, значение $A_к$ для *NRZ*-кода равно 0,86, манчестерского – 2,96, *CMI* – 1,70. С целью снижения шумов приемника нужно выбрать код с наименьшей шириной спектра сигнала.

4.3.4. Максимальное число послсдовательных нулей или единиц

Число, которое может иметь линейный сигнал, характеризует синхронизирующие свойства кода. Для упрощения тракта выделения тактовой частоты желательно выбирать коды с минимальными значениями этих параметров.

4.3.5. Диспаритетность (дисбаланс).

Определяется разностью между числом единиц и нулей в цифровом сигнале, характеризует баланс кода и содержание НЧ-компонент в спектре сигнала. Код с постоянной диспаритетностью всегда имеет одинаковое превышение нулей или единиц, код с нулевой диспаритетностью всегда имеет одинаковое число разрядов с нулями и единицами, равными друг другу. Чем меньше диспаритетность кода, тем меньше в нем содержание НЧ-компонент.

Критериями диспаритетности являются само значение диспаритетности d, числовая сумма D и вариации числовой суммы *VDS*.

При расчете диспаритетности d двоичных сигналов в соответствии с рекомендациями *МККТТ* число единиц следует умножить на вес одной единицы, равный +0,5, а число нулей – на вес одного нуля, равный –0,5.

Числовая сумма определяется как алгебраическая сумма амплитуд посылок

$$D = \sum_{i=1}^{k} (a_i - \bar{a}_i),$$

где a_i – значение амплитуды i-й посылки, $\bar{a}_i$ – математическое ожидание амплитуды i-й посылки.

Для электронных кабельных систем балансным считается код, у которого положительные и отрицательные разности ($\bar{a}_i - \underline{a}_i$) расположены симметрично относительно a_i причем, как правило, $\bar{a}_i$ выбирается равным 0. Поскольку посылки оптического сигнала не могут быть отрицательными для оптических систем балансным считается код, у которого математическое ожидание посылок не равно нулю, положительные и отрицательные разности ($\bar{a}_i - \underline{a}_i$) – могут располагаться несимметрично относительно $\bar{a}_i$, но суммы нормированных амплитуд групп символов должны быть одинаковы для всех групп.

Как известно, в энергетическом спектре балансного кода (сигнала) низшие частоты непрерывной составляющей спектра значительно подавлены.

Вариация числовой суммы *VDS* определяется как

$$N_0 = N_2 - N_1,$$

где N_1 и N_2 – границы изменения числовой суммы D.

Например, для кода *5B6B* вариации числовой суммы равны ±3. Чем меньше диспаритетность и *VDS* выбранного кода, тем проще требования к приемнику проектируемой системы.

4.3.6. Коэффициент потерь динамического диапазона

Присутствие в спектре сигнала НЧ-компонент затрудняет работу АРУ приемника, снижает динамический диапазон. Доля НЧ-компонент зависит от сбалансированности кода (в частности, величины *VDS*). В общем случае математическая зависимость здесь весьма сложная, но для импедансного приемника коэффициент потерь динамического диапазона из-за *VDS* приближенно определяется как:

$$K_{дд} \cong 10 \lg N_0 E.$$

С увеличением эффективности пропорционально растут вариации числовой суммы, и сужается динамический диапазон приемников.

4.3.7. Коэффициент умножения ошибок

Одна ошибка передачи может обусловить множество ошибок в декодированных данных. Это явление описывается с помощью коэффициента умножения ошибок K_e, который обычно представляет среднее или максимальное число ошибок на выходе декодера при одиночной ошибке передачи. Приближенное значение для алфавитных блочных кодов *mBnB* будет таким: $K_e \approx m/2$.

4.3.8. Сложность кодера

Параметр характеризуется числом значений S_m, которое может получить текущая числовая сумма на конце каждого кодового интервала. Сложность кодера возрастает экспоненциально по мере того, как уменьшается избыточность.

Следует отметить, что пока еще не выработан обобщенный критерий качества кода, учитывающий всю или большую часть совокупности требований к коду. Связано это с тем, что в разных применениях степень важности (весовые коэффициенты) тех или иных свойств кодов различна. Например, для высокоскоростных ОЭЛВС важное значение будет иметь эффективность кода, увеличение технической скорости передачи. Для низкоскоростных ОЭЛВС первостепенное значение имеет простота и дешевизна кодирующих и декодирующих устройств.

4.4. Типы кодов потенциально пригодных для ОЭЛВС

Известно большое количество кодов для волоконно-оптических систем связи, но общепринятой классификации до сих пор не существует [23]. В ОЭЛВС и местных линиях передачи данных наибольшее применение по-видимому найдут блочные бинарные *mBnB* коды. В блочных кодах с фиксированной длиной символы исходного сигнала разделяются на блоки, состоящие из одинакового числа m символов, и каждый такой блок кодируется блоком из n кодовых символов, причем $n > m$, где m и n являются целыми положительными числами. Выбор соответствующего алгоритма преобразования блочных *mBnB* кодов, за счет введения определенной избыточности, позволит сформировать линейный сигнал, в большей или меньшей мере удовлетворяющий предъявляемым требованиям.

Для ОЭЛВС также перспективными могут оказаться следующие типы блочных кодов, отличие между которыми заключены в значениях m и n: *1B2B*; *mBnB* ($n=m+k$), *mB1C(1P)*-коды.

4.4.1. *1B2B*-коды

На первых этапах развития ЛВС, когда в основном осуществлялась только передача данных между устройствами вычислительной техники и скорости были небольшими, широкое применение нашли

коды *1B2B* ($E=m/n=0,5$), когда один бит информации (длина такта T) передается двумя битами сигнала (каждый бит с длиной такта $T/2$), один из которых представляет символ нуль, а другой – символ единицу (табл. 2). Скорость передачи символов такого кода возрастает вдвое, но зато гарантируется отсутствие длинных последовательностей нулей и единиц, и тем самым обеспечиваются низкая диспаритетность кодированного сигнала и легкость выделения тактовой синхронизации. Кроме того, коды *1B2B* сравнительно просты в реализации.

Таблица 2. Порядок формирования последовательных сигналов в коде *1B2B*

Наименование разновидностей кода *1B2B*	Входная последовательность								
	1	0	0	1	1	1	0	0	1
	Последовательность сигналов линии								
Манчестерский	10	01	01	10	10	10	01	01	10
DBI	01	10	01	10	01	01	10	01	10
CMI	11	01	01	00	11	00	01	01	11
DMI	11	01	01	00	11	00	10	10	11
Миллеровский	10	00	11	10	01	10	00	11	10

Существует большое число разновидностей *1B2B*-кода. Наибольшее распространение среди них нашел *манчестерский или бифазный код*. Логическая единица в манчестерском коде кодируется символами «10», а логический нуль – символами «01», т. е. код имеет нулевую диспаритетность в любой кодовой группе линейного сигнала. Следовательно, этот код относится к позиционно-импульсной модуляции, которая характеризуется установлением оптического импульса на одном из двух положений внутри тактового интервала. При манчестерском кодировании наблюдается обязательная смена уровня сигнала в середине тактового интервала, причем для отображения логической единицы принят переход с высокого уровня к низкому, а для логического нуля – наоборот. При манчестерском кодировании в приемнике не требуется определять уровень мощности принимаемого сигнала, а декодирующее устройство устанавливает принадлежность принятого оптического импульса тому или иному двоичному символу на основе максимума апостериорной вероятности [20].

Последовательность логических нулей и единиц будут представлять в манчестерском коде меандры с периодом T, отличающимся фазовым сдвигом $T/2$. Это является недостатком манчестерского кодирования, так как последовательность логических нулей может быть принята за последовательность единиц из-за «проскальзывания» синхросигнала на один бит, равный $T/2$ исходного тактового интервала.

В то же время манчестерский код дает возможность обнаружить ошибки в каждом передаваемом разряде, если учесть ту особенность, что информационный переход имеет место в середине интервала, соответствующего исходному биту. Поскольку присутствие высокого или низкого уровня в течение всего интервала T недопустимо, появление таких ситуаций может свидетельствовать о наличии ошибок. Декодирование «0» («1») при передаче «1» («0») в манчестерском коде может произойти только тогда, когда из-за помехи инверсия логических уровней будет иметь место в каждой половине интервала одного бита, однако вероятность одновременной инверсии фазы в пределах одного бита невелика.

Одной из разновидностей кода *1B2B* является дифференциальный или относительный бифазный код *DBI*. Логические единицы и нули в этом коде представляются сочетанием символов «01» или «10» в зависимости от того, за каким символом (элементом) в линейном коде они следуют: при высоком уровне *NRZ* в течение нескольких битов логическая единица представляется как «01», если же высокий уровень *NRZ* появляется после низкого уровня (передавался нуль), то единица представляется сочетанием «10».

Низкий уровень *NRZ* передается сочетанием «10» после последней единицы и сочетанием «01» после нуля (т. е. всегда повторяется последний элементарный сигнал или символ при передаче низкого уровня). Наоборот, при передаче высокого уровня всегда следует сочетание в противофазе с последним элементарным сигналом.

Достоинством *DBI*-кода является то обстоятельство, что для декодирования не нужна блочная синхронизация.

К двухуровневым кодам *1B2B* относятся также коды *CMI*, *DMI* и код Миллера.

В коде Миллера единица информационного сигнала передается кодовой комбинацией «10» или «01». Таким образом, передача логической единицы всегда сопровождается изменением состояния сигнала в середине бита. Нуль передается группами «11» или «00». Два нуля передаются группами «0011» или «1100» и т. д., то есть при передаче серии последовательных нулей изменение состояния выходного сигнала возможно только в конце периода действия входного сигнала. Последовательность логических нулей (низкий уровень кода *NRZ*) будет соответствовать меандру с периодом $2T$, а последовательность логических единиц (высокий уровень кода *NRZ*) меандру с периодом T, причем начальные фазы меандров могут быть произвольными. Это так называемый частотно-манипулированный (ЧМн) код. Код Мил-

лера или ЧМн-код характеризуется более узким энергетическим спектром, чем другие разновидности кода *1B2B*.

Особенностью кодов *CMI* и *DMI* является то, что единицы информационного сигнала передаются чередованием символов «11» и «00». Различие алгоритмов формирования кодов *CMI* и *DMI* состоит в особенности передачи нулей информационного сигнала. В *CMI* нули всегда передаются комбинацией символов «01», а в *DMI* – комбинацией «01», если предшествующий символ «1», и «10», если предшествующий символ «0».

Таким образом, в коде *CMI* последовательность логических нулей будет соответствовать меандру с периодом *T*, а каждая последовательность логических единиц – меандру с периодом *2T*. Из-за разных частот следования меандров этот код получил также название модифицированный ЧМн-код. Он характеризуется обязательной сменой нижнего уровня на верхний в середине бита, соответствующего логическому нулю. Логической единице соответствует сочетание «01». При этом приемник может следить за нарушением последовательности «01», так как сочетание символов«10» запрещено. Кроме того, возможно выделение нарушений правила чередования символов «00» – «11».

В коде *CMI* просто организуется выделение тактовой частоты, у него наиболее простой алгоритм формирования, поэтому он имеет наибольшую надежность и простоту аппаратной реализации кодера и декодера по сравнению с другими разновидностями кода *1B2B*.

4.4.2. Коды *mBnB* ($m>1$, $n=m+k$)

Формирование *mBnB* – кодов осуществляется с помощью альтернативных или знакопеременных преобразований, когда кодовая группа из m разрядов представляется любым из двух дополнительных сигналов. Эти два вида представления или алфавита (позитивное и негативное) имеют равные и противоположные по знаку диспаритетности. Пользуясь определенным алгоритмом, можно ограничить в заданных пределах текущую диспаритетность, а также максимальное число одинаковых последовательных символов, т. е. сформировать цифровой сигнал, удовлетворяющий требованиям к кодам в линиях.

В *mBnB* кодах вводимая избыточность $J = k/(m+k) < 0{,}5$, поэтому они не требуют двухкратного увеличения тактовой частоты, как коды *1B2B*, что позволяет при тех же требованиях к сигналам на входе схем решения за счет сужения полосы приемников увеличить дальность связи или достоверность передачи информации. Однако правила кодирования таких сигналов, схемы кодеров и декодеров соответственно более сложны по сравнению с сигналами *1B2B*. Поэтому блочные коды этого класса получили распространение в высокоскоростных системах, передающих информацию на большие дальности, где, несмотря на усложнение кодеров и декодеров можно снизить стоимость, увеличивая расстояние между повторителями-регенераторами.

В связи с ростом скоростей передачи коды *mBnB* также могут найти применение в ОЭЛВС. Например, стандарт *FDDI* рекомендует блочный код *4B5B*, эффективность которого E=80%.

4.4.3. Бит-вводимые коды *mB1C* и *mB1P*

В бит-вводимых кодах к блоку из m информационных символов по определенным правилам добавляется один символ с целью придания коду необходимых свойств, главным образом для того, чтобы не допустить длинных последовательностей одинаковых символов [23, 24].

При формировании кодов *mB1C* к m информационным символам добавляется один дополнительный, обозначаемый *1C*. Дополнительный бит принимает значение «1» или «0» в зависимости от последнего (m-го) информационного символа. Если информационный символ был «1», то C – символ принимает значение «0», если же m-й символ имел значение «0», то символ C принимает значение «1».

С этой точки зрения к кодам *mB1C* можно отнести бифазный (манчестерский) код, поскольку его можно записать как *1B1C*.

Для снижения избыточности кода *mB1C* значение m следует увеличивать, но при этом увеличивается длина возможных последовательностей одинаковых символов. Поэтому обычно $m<10$, поскольку при большем числе одинаковых символов затруднено выделение тактового синхросигнала.

Вероятность появления одинакового числа нулей и единиц можно приблизить к 0,5 предварительным скремблированием. Контроль ошибок может быть реализован путем сравнения двух символов: m-го информационного и C-символа, поскольку они всегда противоположны.

В кодах *mB1P*, где m – количество информационных символов и P – дополнительный символ, информационный сигнал предварительно скремблируется, а затем формируются сигналы *mB1P*. При этом если m – нечетное число, то символ P принимает значение «1», если m – четное, то символ P принимает значение «0». Тогда диспаритетность кодового слова ($m+P$) с вероятностью близкой к «1» будет равна нулю, поэтому символ P называют *паритетным* символом. Как правило, в кодах *mB1P* число информационных символов достаточно велико, поэтому эти коды характеризуются малой избыточностью, например, в известном коде *17B1P* избыточность равна 0,055, эти коды позволяют осуществить контроль ошибок в регенераторах (по числу единиц, которое всегда четное).

4.5. Сравнение и оценка блочных кодов

Числовые характеристики некоторых блочных кодов сведены в таблицу 3. Анализ этих кодов с точки зрения использования их в ОЭЛВС позволяет сделать следующие выводы.

4.5.1. Коды *1B2B*

Основной недостаток кодов *1B2B* – малая эффективность (большая избыточность), в результате чего техническую скорость передачи символов приходится увеличивать в два раза по сравнению с кодом *NRZ*. Из-за расширения полосы приемника соответственно на 3 дБ увеличивается коэффициент оптических потерь в регенераторной секции, который определяется как разность потерь в тракте регенераторной секции при использовании *NRZ*- или *mBnP* – кодов [21].

По другим характеристикам, коды *1B2B* имеют существенные преимущества перед блочными и *NRZ*-кодами: отличная сбалансированность по нулям и единицам придает кодам хорошие синхронизирующие свойства, небольшая величина *VDS* и соответственно малое содержание НЧ-компонент в спектре сигнала обуславливают широкий динамический диапазон приемников, простота процедуры кодирования обеспечивает дешевизну и надежность кодеров и декодеров, из-за малой длины блоков отсутствует размножение ошибок.

Таблица 3. Характеристика кодов

Коды	Эффективность E, %	Возрастание оптических потерь по сравнению с *NRZ*, дБ	Максимальное число одинаковых последовательных элементов	Вариация числовой суммы *VDS*	Коэффициент потерь динамического диапазона $K_{дд}$, дБ	Коэффициент умножения ошибок K_e	Коэффициент увеличения технической скорости передачи
1B2B:							
DMI	50	3,0	2	1,0	–3,0	1,0	2
CMI	50	3,0	3	1,5	–1,2	1,0	2
3B4B	75	1,2	4	3	3,5	1,5	1,33
5B6B	83	0,8	6	4	5,2	2,5	1,25
7B8B	88	0,6	6	6	7,2	3,5	1,14
9B10B	90	...	8	7	8,0	4,5	1,1
11B12B	92	...	10	8	8,7	5,5	1,09
13B14B	93	...	12	9	9,2	6,5	1,08

По этим причинам коды *1B2B* широко применяются в тех локальных сетях, где двукратное увеличение технической скорости передачи не является ограничивающим фактором и где эти коды способствуют снижению стоимости подключения абонентов к сетям.

4.5.2. Коды *mBnB*

В блочных кодах с $n=m+k$ эффективность $E=m/(m+k)$ выше по сравнению с кодами *1B2B*. Можно указать на ряд преимуществ и недостатков высокой эффективности [21].

Преимущества более высокой эффективности *mBnB* – кодов:

– меньший коэффициент оптических потерь приводит к увеличению длины ретрансляционного участка;

– низкая символьная скорость (коэффициент увеличения технической передачи в линии <2) приводит к тому, что более простой и дешевой становится оптоэлектронная и электронная схемотехника.

Недостатки высокой эффективности *mBnB*-кодов:

– возрастающая сложность и стоимость кодеров и декодеров;

– недостаточная сбалансированность кода, что сужает динамический диапазон приемников, затрудняет выделение сигнала синхронизации, усложняет и удорожает схемы выделения тактовой частоты;

– увеличение коэффициента размножения ошибок, равного $m/2$.

По этим причинам блочные *mBnB*-коды применяются в тех сетях, где применение более простых кодов *1B2B* невозможно из-за скоростных ограничений.

4.6 Схемы манчестерского кодирования

Схемы кодирующего и декодирующего устройств манчестерского кода и временные диаграммы формирования сигналов приведены на рис. 6. Этот код наиболее часто применяется в низкоскоростных (до 100 Мбит/с) локальных сетях [25].

Для того чтобы получить манчестерский код из *NRZ*-сигнала, необходимо иметь две фазы (*A* и *B*) синхроимпульсов. Кодирующая логика показана на рис. 6*б*, она построена на основе RS-триггера и других элементов цифровой логики. Логические функции установки в состояние «1» (Set) и «0» (Reset) определяются как

$$Set = A\ data + B\ \overline{data},$$

$\mathrm{Re}set = A\,\overline{data} + B\,date$.

Выход RS-триггера является выходом манчестерского кода при *NRZ*-входе.

Декодирующая логика показана на рис. 6*г*, она также построена на основе RS-триггера. Логические функции декодирующей логики определяются как

$Set = A\ data$,

$\mathrm{Re}set = A\,\overline{data}$.

Работа декодера должна быть синхронизирована с кодером. Это достигается настройкой имеющегося в декодере синхросигнала, используя переходы в принимаемом сигнале. Синхроимпульсы делятся на 2, чтобы регенерировать фазу *A*.

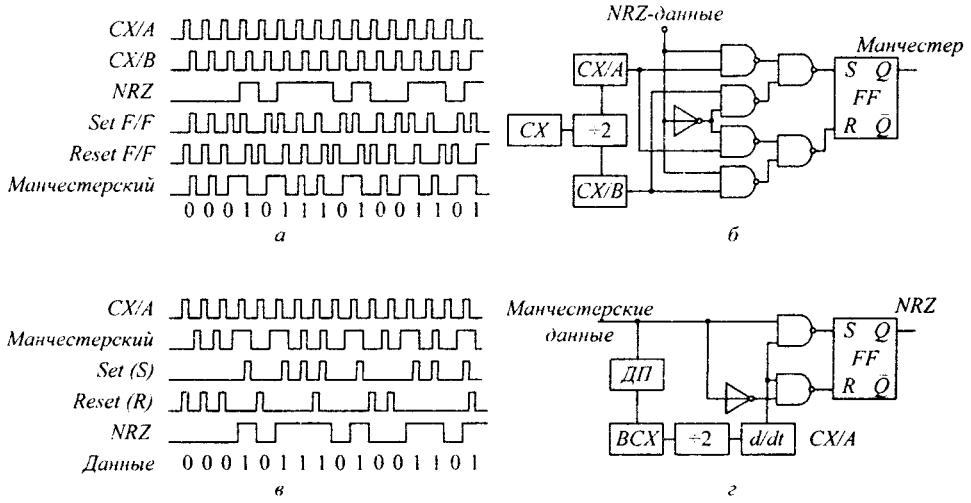


Рис. 6. Манчестерское кодирование: *а, в* – временные диаграммы операций кодирования и декодирования; *б, г* – схемы кодера и декодера; *CX/A*, *CX/B* – синхросигналы фазы *A* и *B*; *ДП* – детектор переходов; *BCX* – внутренняя синхронизация

Заключение

Волноводно-оптическая линия, образуя физическое соединение между объектами (станциями) ОЭЛВС, является ее основным конструктивным блоком. Компоненты ОЭЛВС, составляющие оптоэлектронные аппаратные средства физического уровня, как и сами ОЭЛВС, интенсивно развиваются. Связано это как с объективной необходимостью повышения производительности вычислительных средств, так и с насыщением рынка волноводно-оптическими элементами и устройствами средств для магистральной связи.

Что касается физической передающей среды – оптических волноводов, следует отметить тенденции к применению градиентных «утолщенных» волоконных световодов, что позволяет повысить эффективность ввода излучения СИД в оптический тракт, и одномодовых волоконных световодов в диапазоне длин волн 1300 – 1600 нм для высокоскоростных ОЭЛВС.

Среди оптоэлектронных компонентов физических линий в сравнительно низкоскоростных ОЭЛВС вследствие высокой надежности, простоты устройства и эксплуатации и дешевизны широкое применение найдут СИД и *pin* -фотодиоды. Прогнозируется, что дальнейшее развитие позволит применять эти компоненты в сетях со скоростями передачи выше 6 Гбит/с совместно с одномодовыми волокнами.

Протоколы физического уровня локальных сетей включают в себя процедуры синхронизации и кодирования передаваемой информации.

Выбор кода – сложная и чрезвычайно важная проблема, от правильного решения которой зависят технико-экономические показатели приемопередающей аппаратуры и всей системы в целом.

Многообразие видов существующих ЛВС и требований к ним не позволяет разработать один оптимальный код для ОЭЛВС.

В ОЭЛВС могут найти применение блочные *mBnB*-коды, среди них наибольшее распространение могут иметь коды *1B2B* и особенно манчестерский код для сетей со скоростью передачи до 10000 Мбит/с. В связи с тенденцией к повышению скорости передачи в локальных сетях, для ОЭЛВС представляются более эффективными коды *mBnB* ($n=m+k$) и бит-вводимые коды типа *mB1C*.

РЕЗЮМЕ

В статті розглядаються сучасний стан і тенденції розвитку апаратних засобів фізичного рівня оптоелектронних локальних обчислювальних мереж (ОЕЛОМ). Наводиться аналіз оптичних світловодів і компонентів ОЕЛОМ. Для забезпечення максимальної швидкості передачі інформації в ОЕЛОМ пропонується використання блочних кодів.

SUMMARY

The article highlights state-of-the-art and tendencies of the development of optoelectronic local computing network (OELCN) hardware. The analysis of optical lightguides and OELCN components is made. To provide the maximum speed of data transfer in OELCN, the use of block code is suggested.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Щука А.А. Электроника. Под ред. А.С.Сигова. – СПб.: БХВ-Петербург, 2006. – 800 с.
2. Федотов Я.А. Функциональная электроника. – М.: Высшая школа, 2000. – 387 с.
3. Убайдуллаев Р.Р. Волоконно-оптические сети. – М.: Эко-Трендз, 2002. – 269 с.
4. Фриман Р. Волоконно-оптические системы связи: Пер. с англ. – М.: Техносфера, 2006. – 496 с.
5. Agrawal G.P. Fiber-optic communications systems. – N.-Y.: John Wiley and Sons, 2002. – 461 p.
6. Agrawal G.P. Lightwave technology: telecommunication systems. – N.-Y.: John Wiley and Sons, 2005. – 546 p.
7. Perros H.G. Connection-oriented networks: SONET/SDH, ATM, MPLS and optical networks. – N.-Y.: John Wiley and Sons, 2005. – 332 p.
8. Information Processing Systems – Fiber Distributed Data Interface (FDDI) – Part 3: Physical Layer Dependent Requirements. ISO/IES/DIS 9314.3, 1989.
9. Гауэр Д. Оптические системы связи: Пер. с англ. – М.: Радио и связь, 1989. – 504 с.
10. http://www.ofsoptics.com/fiber/
11. http://www.corning.com/opticalfiber/products__applications/
12. http://www.research.philips.com
13. http://www.ofsoptics.com
14. Green P. E. Fiber to the home: the new empowerment. – New Jersey: John Wiley and Sons, 2006. – 144 p.
15. Graeme J. G. Photodiode Amplifiers. – Boston: McGraw-Hill, 1995. – 253 p.
16. Ghafouri-Shiraz H. Distributed feedback laser diodes and optical tunable filters. – N.-Y.: John Wiley and Sons, 2003. – 317 p.
17. Дмитриев Е. Фотоприемники для работы в мультиспектральных оптоэлектронных системах // Электроника НТБ. – 2005. – №8. – С. 36-40.
18. Оптоэлектронные элементы и устройства / А.К.Гребнев, В.Н.Гридин, В.П.Дмитриев; Под ред. Ю.В.Гуляева. – М.: Радио и связь, 1998. – 336 с.
19. Säckinger E. Broadband circuits for optical fiber communication. – N.-Y.: John Wiley and Sons, 2005. – 436 p.
20. Новиков Ф.А. Дискретная математика для программистов. – СПб.: Питер, 2001. – 304 с.
21. Теория электрической связи: Учебник для вузов / А.Г.Зюко, Д.Д.Кловский, В.И.Коржик, М.В.Назаров; Под ред. Д.Д.Кловского. – М.: Радио и связь, 1999. – 432 с.
22. Липкин И. А. Статистическая радиотехника. Теория информации и кодирования. – М.: Вузовская книга, 2002. – 216 с.
23. Скляр Б. Цифровая связь. Теоретические основы и практическое применение: Пер. с англ. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2003. – 1104 с.
24. Олифер В.Г., Олифер Н.А. Компьютерные сети: принципы, технологии, протоколы. – СПб.: Питер, 2007. – 958 с.
25. Палмер М., Синклер Р.Б. Проектирование и внедрение компьютерных сетей: Пер. с англ. – СПб.: БХВ-Петербург, 2004. – 752 с.

Надійшла до редакції 05.11.2007 р.

УДК 621.391.264.4

АКУСТООПТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССОРЫ РАДИОСИГНАЛОВ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

Т.В.Белик, В.В.Данилов

В работе [1], рассматривались перспективы и возможности некоторых классов устройств обработки сигналов на принципах функциональной электроники. Побудительные причины перехода на принципы функциональной электроники при миниатюризации радиоэлектронной аппаратуры изложены в работах [2,3].

В настоящей работе проведен обзор возможных реализаций устройств обработки радиосигналов (РС) функциональной электроники – акустооптических Фурье-процессоров (АОФП) с пространственным интегрированием, предназначенных для вычисления энергетического и комплексного спектров [4] в реальном масштабе времени в составе информационно-измерительных систем специального назначения. Показаны существующие реализации и результаты экспериментальных исследований (в основном по работам авторов) элементной базы таких процессоров, в частности, акустооптических модуляторов и широкополосных усилителей РС.

Классификационный анализ АОФП с временным интегрированием и возможные структуры их аппаратных средств изложены в работе [5]. Возможности АОФП по организации вычислительных процедур приведены в работе [6]. Структурно, акустооптические Фурье-процессоры подразделяются на устройства с прямым преобразованием и интерференционные устройства [4].

1. Акустооптический Фурье-процессор с пространственным интегрированием прямого преобразования

Акустооптические Фурье-процессоры находят применение при решении следующих задач [7-9]: контроля спектра излучения источников радиосигналов; обнаружения с высокой вероятностью и за короткое время источников излучения в широкой полосе частот в системах предупреждения о радиолокационном облучении; обнаружения и анализа сигналов РЛС, систем опознавания «свой-чужой», систем управления воздушным движением, навигационных систем и средств связи; контроля помеховых сигналов по частоте, мощности и времени их появления; пассивной пеленгации и идентификации летательных аппаратов по их радиоизлучению; определения координат источников излучения триангуляционным методом (когда разведывательный приемник используется как пассивный датчик, уменьшающий ошибку измерения координаты); пассивной пеленгации постановщиков помех.

Блок-схема АОФП прямого преобразования (ПП) представлена на рис. 1. Формирователь светового распределения предназначен для преобразования лазерного пучка в широкий световой пучок с равномерным распределением интенсивности в пределах оптической апертуры акустооптического модулятора (АОМ), с плоским волновым фронтом. АОМ используется для ввода радиосигналов в оптический процессор [6]. Анализируемый радиосигнал поступает на вход широкополосного усилителя и далее на электроакустический преобразователь (ЭАП) АОМ, посредством которого преобразуется в пространственно-временной аналог – бегущие в среде светозвукопровода (СЗП) АОМ упругие (акустические) волны. В результате взаимодействия в фотоупругой среде СЗП акустического и светового полей формируются рассеянные световые волны, причем световая волна, формирующая первый дифракционный порядок, содержит полную информацию о входном (анализируемом) радиосигнале.

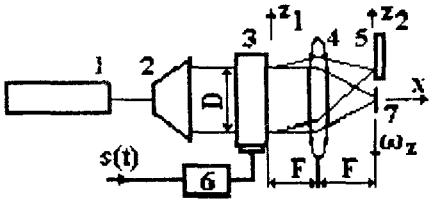


Рис. 1. Блок – схема акустооптического Фурье-процессора прямого преобразования с пространственным интегрированием, 1 – лазер, 2 – формирователь светового распределения, 3 – акустооптический модулятор, 4 – фурье-линза, 5 – линейка фотоприемников, 6 – широкополосный усилитель радиосигналов, 7 – заглушка

Так как световые распределения в передней и задней фокальных плоскостях фурье–линзы связаны преобразованием Фурье [4], то в выходной плоскости анализатора спектра (задняя фокальная плоскость фурье-линзы) формируется световое распределение, амплитуда которого пропорциональна мгновенному гармоническому спектру Фурье входного радиосигнала. В общем случае, процесс преобразования входного радиосигнала в оптический аналог при дифракции света на упругих волнах не линеен [4], однако при ограничениях сформулированных в [6], можно считать, что процесс преобразования радиосигнала в эквивалентное световое распределение осуществляется линейно. В этом случае акустооптический процессор радиосигналов с пространственным интегрированием (до выходной плоскости – где размещена линейка фотоприемников) можно считать линейным прибором.

© Белик Т.В., Данилов В.В.

Основным математическим соотношением, описывающим работу АОФП, является интеграл суперпозиции [10]:

$$S_2(\omega,t) = \int_{-\infty}^{\infty} S_1(\omega')g(\omega,\omega',t)d\omega', \quad (1)$$

где $S_1(\omega')$ – спектральное распределение на входе АОФП, $g(\omega,\omega',t)$ – аппаратная функция, $S_2(\omega)$ – спектральное распределение на выходе анализатора.

Аппаратная функция, является основной характеристикой процессора радиосигналов и определяется как отклик на входное δ-воздействие, которым является в частотной плоскости гармоническое колебание. Аппаратная функция для идеального АОФП может быть записана в форме [10,11]:

$$g_0(\omega,\omega',t) = \frac{\sin[0{,}5(\omega-\omega')T]}{0{,}5(\omega-\omega')T} e^{j[(\omega-\omega'))t-0{,}5T]}, \quad (2)$$

где T – длительность временной выборки сигнала, находящегося в апертуре АОМ, которая равна D=VT (V – скорость акустической волны в СЗП), ω' – частота входного оптического аналога радиосигнала, ω – текущая частота. В работе [11] было показано, что спектральный прибор, аппаратная функция которого определяется в соответствии с (1), определяет *мгновенный* гармонический спектр входного сигнала.

Основными техническими характеристиками АОФП являются [5,7-10,11]: – полоса одновременно анализируемых частот Δf; разрешающая способность Δf_p; время проведения спектрального анализа τ; динамический диапазон (ДД); погрешность спектрального анализа Δ.

Под полосой одновременно анализируемых частот следует понимать частотный интервал, в котором одновременно может осуществляться спектральный анализ. Параметр Δf определяется частотными свойствами акустооптического взаимодействия (АОВ) в АОМ., частотными свойствами согласующей, входное сопротивление АОМ и выходное широкополосного усилителя, цепи, частотными свойствами фотосчитывающего устройства.

Под разрешающей способностью АОФП, предлагается понимать способность прибора различать две δ-функции, поступающие на его вход в частотном пространстве, т.е. различать по некоторому критерию, обычно Рэлея, две аппаратные функции. При использовании названного критерия, разрешающая способность идеального АОФП ПП с пространственным интегрированием определяется [5]

$$\Delta f_p = 1/T = L/V, \quad (3)$$

где L – длина акустооптического взаимодействия в СЗП.

В реальном приборе необходимо учитывать искажения светового распределения по апертуре АОМ. Как было установлено в [4,20], уменьшение интенсивности света по краям оптической апертуры АОМ приводит к уменьшению разрешающей способности АОФП по частоте. Аналогичное влияние на характеристики акустооптического процессора радиосигналов оказывает поглощение и дифракционная расходимость упругих волн в светозвукопроводе АОМ. Иногда для оценки разрешающей способности пользуются понятием ширины аппаратной функции, которая определяется в соответствии с (2).

Несмотря на то, что АОФП является линейным прибором, его компоненты строятся на основе нелинейных явлений, например акустооптического взаимодействия (АОВ) в АОМ и фотоэлектрического преобразования в линейке фотоприемников. Нелинейность амплитудной характеристики АОВ приводит к искажениям сигналов. Характер и величина нелинейных искажений зависит от вида входного сигнала. Для характеристики нелинейности АОФП предлагается, как и в электронных устройствах аналогичного функционального назначения ввести понятие динамического диапазона, определив его [16]:

$$ДД = \lg\frac{X_{\max}}{X_{\min}}, \quad (4)$$

где $X_{\min}$ и $X_{\max}$ – минимальное и максимальное значение входного сигнала. Минимальное значение входного сигнала зависит от уровня собственных шумов прибора. Максимальное значение сигнала определяется из условия не превышения искажениями некоторого допустимого уровня для тестового сигнала. Для определения $X_{\max}$ используются односигнальный, двухсигнальный и многосигнальный метод [12,13]. Если выбирается односигнальный метод, верхний уровень входного сигнала определяется допустимой нелинейностью амплитудной характеристики прибора, при двухсигнальном методе испытаний

– допустимым уровнем взаимомодуляционных искажений. Уровень $X_{\min}$, при котором отношение сигнал/шум в выходной плоскости прибора равно заданной величине, определяется качеством элементов и их юстировки в оптической схеме АОФП. В работе [14] предложено, при использовании двухсигнального метода, динамический диапазон АОФП, в котором АОМ работает в режиме Рамана-Ната рассчитывать согласно выражению:

$$ДД_1 = 20\lg\frac{J_0(a_0)}{J_2(a_0)}, \quad (5)$$

где a_0 – индекс фазовой модуляции, J_0, J_1, J_2, J_3 – функции Бесселя. При работе АОМ в АОФП в режиме Брэгга ту же характеристику определить как

$$ДД_2 = 20\lg\frac{J_1(a_0)}{J_3(a_0)}. \quad (6)$$

Динамический диапазон АОФП, где АОМ работает в промежуточном режиме, предлагается оценивать в соответствии с выражением:

$$ДД_3 = 20\lg\frac{a_0 - 2c_3a_0^3 + 8c_5a_0^5}{2c_3a_0^3 - 10c_5a_0^5}, \quad (7)$$

где коэффициенты c_i определяются в соответствии с графиком, показанным на рис. 2. Представлены графические зависимости определения динамического диапазона акустооптического взаимодействия АОМ, рассчитанные по формулам (5) – (7). Приблизительно аналогичные результаты дает и односигнальный метод определения динамического диапазона АОФП. Таким образом, величина ДД для АОФП ПП может достигать 70 дБ.

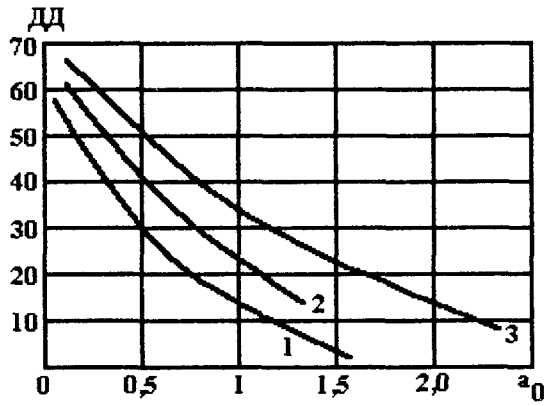


Рис. 2. Динамический диапазон АОФП при работе АОМ в режимах Рамана-Ната (1), Брэгга (3) и в промежуточном режиме (2) при Q_{KK} =5

Другим нелинейным элементов схемы АОФП является квадратичный фотоприемник в виде линейки (фоторегистрирующее устройство), регистрирующий выходное световое распределение. Для выпускаемых в России многоэлементных линеек фотоприемников (1024 элемента), динамический диапазон по входному оптическому полю ограничен величиной 30 дБ [24]. Вместе с тем, известны образцы серийных фотолинеек с числом элементов 2048 и с встроенным логарифмическим усилителем, обеспечивающим динамический диапазон до 60дБ [15].

Погрешность вычисления спектральных компонент, в зависимости от выбранной модели сигнала (детерминированный или статистический), определяется различными алгоритмами [16-18]. При статистической модели сигнала, либо аддитивной смеси детерминированного сигнала и шума, в качестве модели предлагается использовать статистические оценки [17]. При детерминированной модели измерений, основанной на детерминированной модели сигнала, оценка погрешности основывается на сравнении измеренного значения и «истинного» значения измеряемой величины [18]. "Истинное" значение измеряемой величины предлагается в виде функционала, определяющего расстояние между "истинной" и измеренной функциями. Тогда, в линейном нормированном пространстве (пространство L_p) погрешность анализа можно определить в виде:

$$\Delta = \frac{\left\{ \int\limits_{x<X} | f_{ист}(x) - f_{изм}(x) |^p \, dx \right\}^{1/p}}{\left\{ \int\limits_{x<X} | f_{ист}(x) |^p \, dx \right\}^{1/p} + \left\{ \int\limits_{x<X} | f_{изм}(x) |^p \, dx \right\}^{1/p}}. \qquad (8)$$

Использование детерминированной модели позволяет оценить искажения, вносимые не идеальностью элементов, входящих в состав АОФП, определить погрешность спектрального анализа реальным акустооптическим процессором.

Необходимо отметить, что в силу отсутствия нормативных документов на разработку и постановку на производство акустооптических приборов предназначенных для вычислений спектральных распределений, в настоящий момент, отсутствуют соответствующие термины и определения. Поэтому, при формировании перечня технических характеристик (ТХ) АОФП предлагается ориентироваться на терминологию, введенную в работах [11,19]. В соответствии с ней перечень ТХ АОФП содержит: диапазон частот одновременного анализа – 47,5...72,5 МГц; частотное разрешение (по критерию Рэлея) двух одновременно принятых сигналов – 40 кГц; дискрет измерения частоты – 40 кГц; время опроса фоторегистрирующим устройством прибора полосы рабочих частот – 1 мс; динамический диапазон – 21 дБ; оперативную память индикатора прибора – 8 спектральных картин; емкость буферной памяти для сопряжения с ЭВМ – 64 спектральных картины; сопряжение АОФП с ЭВМ реализовано по интерфейсу «КОП»; питание прибора от сети постоянного тока 27 В; мощность потребляемая от сети, при номинальном напряжении, не более 70 Вт; габаритные размеры 240x470x580 мм; масса прибора, не более 40 кг. Численные значения характеристик принадлежат макету процессора созданному в коллективе авторов при НИИ комплексной автоматизации (НИИКА).

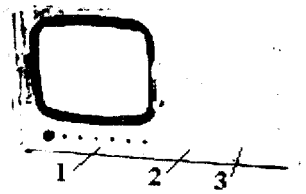


Рис. 3. Внешний вид акустооптического Фурье – процессора, 1 – блок индикации, 2 – блок сопряжения с ЭВМ, 3– блок акустооптической обработки (БАО)



Рис. 4. Общий вид БАО

Внешний вид АОФП и его функциональных блоков показан на рис. 3. Блок акустооптической обработки (БАО), представлен рисунком 4. На рис. 5 приведено конструктивно – техническое решение БАО. Изготовленные на технологической базе НИИКА АОМ для АОФП, представлены на рис. 6.

Практическая реализация широкополосного усилителя (ШУ) показана на рис. 7. На рис. 8 приведен общий вид используемой фотолинейки.

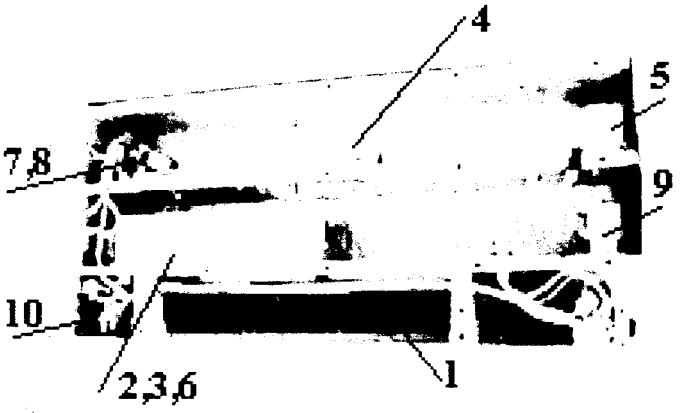


Рис. 5. Конструктивное решение БАО, где 1 – лазер; 2,3,6 – узел, содержащий формирователь светового распределения, акустооптический модулятор, широкополосный усилитель, 4 – фурье – линза; 5 –линейка фотоприемников, 7– заглушка, 8,9,10 – зеркала

Основные структурные элементы блока сопряжения с ЭВМ показаны на рис. 9, в состав блока входит [24]: плата источника питания (ИП); плата аналоговой обработки (ПАО); плата синхронизатора (СИН) и знакогенератора (ЗГ); плата ОЗУ-8; плата ОЗУ-64 и, относящаяся к блоку индикации, плата разверток (БР) и видеоусилителя (ВУ). На плате синхронизатора и знакогенератора размещены генератор растровых элементов (ГРЭ) и микшер (М). Кроме того, в кроссплату ПЭВМ вставляется плата интерфейса, осуществляющего обмен между блоками в ЭВМ.

Системным хронизатором является синхронизатор телевизионного типа с генератором растровых элементов в качестве источника тактовой частоты. Особенностью синхронизатора является то, что тактовая частота строчных синхросигналов равна 28 кГц, вместо стандартных ~ 15 кГц. Это связано с тем,

что для отображения 1024 линий спектра необходимо не менее 512 строк в активном поле растра, даже при условии двухъярусного отображения спектра. Кроме того, выделение для каждой спектральной линии отдельной строки развертки существенно снижает апертурные искажения электронно-лучевой трубки (ЭЛТ) и приводит к заметному улучшению качества изображения. С этой же целью, а также для того, чтобы спектр отображался в привычном виде, в блоке индикации на 90^0 повернута отклоняющая система и линии развертки направлены снизу вверх.

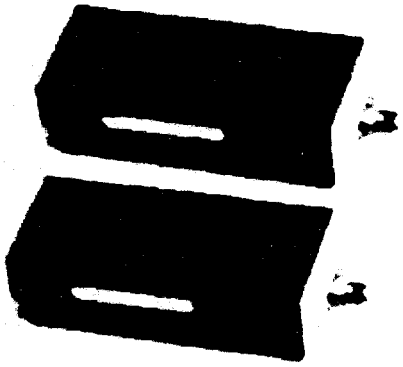


Рис. 6. Акустооптические модуляторы для АОФП

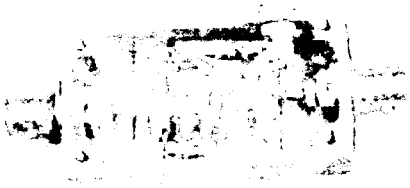


Рис. 7. Широкополосный усилитель АОФП

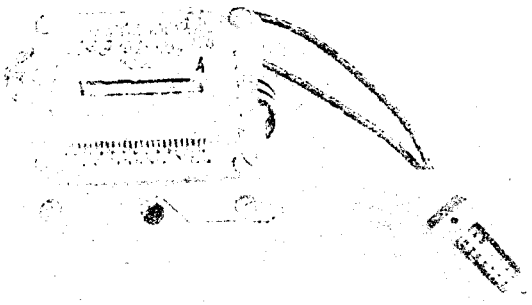


Рис. 8. Общий вид фотолинейки ЛФ1024-25/1А

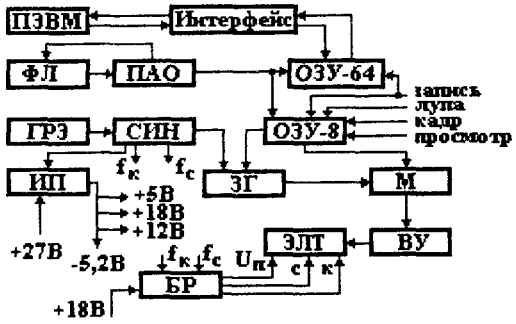


Рис. 9. Структурная схема блоков сопряжения с ЭВМ и индикации

Синхронизатор формирует большой набор синхроимпульсов, необходимых для работы всех структурных элементов, в том числе и импульсы синхронизации источника питания. При включении акустооптического процессора радиосигналов синхронизатор не работает, так как на него не поступает питание. В этом случае источник питания, не получая синхроимпульсов, работает в автоколебательном режиме. При нарастании питающего напряжения до номинального значения +5В, источник переходит в синхронный режим, а на выходах синхронизатора появляется полный набор синхросигналов. На выходе фотолинейки (ФЛ) появляется аналоговый сигнал, который преобразуется АЦП платы ПАО и поступает в виде семиразрядного кода на входы данных ОЗУ-64 и ОЗУ-8. Оперативное запоминающее устройство ОЗУ-64 предназначено для фиксации пачки из 64 кадров спектральных распределений, с целью дальнейшего ввода в ЭВМ. Запоминание пачки начинается с приходом сигнала «запись» (кнопка расположена на передней панели АОФП) и заканчивается с приходом 64-го кадра. После этого, записанная информация, через интерфейс вводится в ЭВМ. Команда на ввод производится с клавиатуры ЭВМ. На время ввода информации в ЭВМ, запись в ОЗУ-64 запрещена, что исключает возможные искажения результатов за счет наложения разных пачек.

По сигналу «запись» происходит также запись в ОЗУ-8, только одного кадра и перед этим счетчик кадров сдвигается на единицу в плюс, обеспечивая тем самым сохранение ранее записанного кадра и запись нового на свободное место. Все остальное время ОЗУ-8 находится в режиме чтения, считывая текущий кадр. Режим «лупы» обеспечивается цепями сильно связанными с ОЗУ-8. Таким образом, в режиме «лупа», ОЗУ-8 обеспечивает считывание не всего кадра (1024 отсчета), а только 64 линий спектра, однако местоположение считывания этих 64 линий в кадре может выбираться кнопками «просмотр», расположенных на лицевой панели АОФП. В результате на один из входов микшера М поступает либо сигнал полного спектра, либо 64 отсчета спектра, в зависимости от выбранного режима отображения. На

второй вход микшера М поступает сигнал цифро-знаковой информации от знакогенератора ЗГ. Знакогенератор предназначен для формирования знаковых сообщений двух видов: статических и динамических. К статическим относятся буквенные надписи обозначения границ частотного диапазона, к динамическим – сообщения отображения номера кадра и значения частоты линии визирования электронной лупы. Сигналы с выхода микшера, через видеоусилитель ВУ поступают на ЭЛТ, которая обеспечивает отображение содержимого кадра.

2. Акустооптический Фурье-процессор радиосигналов с оптическим гетеродинированием (интерференционный)

Основными элементами АОФП ограничивающими его динамический диапазон являются акустооптический модулятор и фоторегистрирующее устройство (ФРУ), точнее, элемент ФРУ – линейка фотоприемников. Как было показано в работе [10,11], в большинстве случаев использование малых индексов модуляции гарантирует низкую плотность мощности акустической волны в СЗП и позволяет не считать акустическую нелинейность фактором ограничивающим динамический диапазон (ДД) АОФП, по крайней мере до 60 дБ. Нижняя граница динамического диапазона определяется традиционно некоторым заданным значением отношения мощности входного сигнала к мощности собственных шумов прибора, которое характеризует степень искажения информации. Действительно, если выходной сигнал АОФП может быть представлен как сумма детерминированного сигнала $S(t)$ и шума (с нулевым средним значением), то комбинированный сигнал в любой момент времени имеет среднее значение $S(t)$ и дисперсию, равную среднему квадрату значения шума. Отношение $(с/ш)^{1/2}$ есть оценка разброса сигнала в фиксированный момент времени относительно действительного значения (из-за действия аддитивных шумов).

В АОФП выходной сигнал есть результат фотодетектирования (процесс преобразования оптического распределения поля в поток электронов), который имеет случайный характер, независимо от того, является поле стохастическим или детерминированным [20]. В этом случае наблюдаемый процесс уже не является суммой полезного сигнала и аддитивных шумов и рассматривается как процесс дробовых шумов, имеющих условно пуассоновскую плотность вероятности. Для данного класса процессов можно показать [21], что усредненная по времени данная спектральная плотность распадается на две части:

$$S(\omega) = | H(\omega) |^2 \{\overline{E[I(t)]} + S_1(\omega)\}, \qquad (9)$$

где $S(\omega)$ – спектральная плотность мощности выходного процесса, $H(\omega)$ – преобразование Фурье переходной функции $h(t)$, определяющей полосу пропускания фотоприемника, $I(t)$ – интенсивность оптического распределения поля, $\overline{E[I(t)]}$ – средняя по ансамблю реализаций и по времени функция интенсивности (знак Е соответствует усреднению по ансамблю, черта сверху – усреднение по времени), $S_1(\omega)$ – спектральная плотность случайного процесса $I(t)$. Таким образом, спектральная плотность мощности процесса на выходе фотоприемника имеет форму фильтрованного спектра интенсивности $| H(\omega) |^2 S(\omega)$ с аддитивным спектром $\overline{E[I(t)]} | H(\omega) |^2$ причем при условии стационарности интенсивности оптического распределения, мощность в спектре дробовых шумов ($P = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{E[I(t)]} | H(\omega) |^2 d\omega$) точно соответствует дисперсии выходного процесса. Приведенные соображения позволяют предположить, что отношение с/ш на выходе фотоприемника оптического процессора можно использовать в качестве параметра, обратного степени искажения сигнала, так как спектр процесса имеет вид спектра «полезного сигнала в аддитивном шуме», однако в нашем случае, сигнал и шум не являются независимыми. Учитывая сказанное, предлагается определить динамический диапазон АОФП в виде:

$$ДД_1 = 10 \lg \frac{P_c}{P_ш}, \qquad (10)$$

где P_c – мощность процесса со спектральной плотностью мощности $| H(\omega) |^2 S_1(\omega)$, $P_ш$ – сумма мощностей процесса.

Дальнейший анализ возможностей расширения динамического диапазона АОФП требует конкретизации архитектуры процессора. Следует отметить, что по используемому алгоритму гетеродинные

Фурье-процессоры по-видимому, можно разделить на три вида. Первый является аналогом АОФП с пространственным интегрированием, собранный по интерферометрической схеме [21]. Второй вид – процессоры на основе временных дисперсионных четырехполюсников [22]. К третьему виду процессоров относятся гетеродинные, с последовательным считыванием результатов обработки [23].

Процессоры по второму и третьему алгоритмам, во-первых, имеют неполный рабочий цикл (что при необходимости непрерывной работы системы, например, кругового обзора радиоэлектронной обстановки, ведет к использованию нескольких аналогичных приборов); во-вторых, темп выдачи информации не превышает длительности обрабатываемого сигнала (не более десятков микросекунд), что без принятия специальных мер, во многих случаях исключает возможность последующей цифровой обработки.

АОФП первого типа является по своей природе параллельным процессором, имеющим непрерывный рабочий цикл, а темп поступления информации во вторичные устройства обработки не связан с алгоритмом его работы.

На рис. 10 представлена структура АОФП с оптическим гетеродинированием (на основе интерферометра). Акустооптический модулятор находится в передней фокальной плоскости фурье-линзы. Размер каждой фоточувствительной площадки – l_1, расстояние между ними $l_2 - l_1$. Свет во второе плечо интерферометра вводится посредством левого полупрозрачного зеркала и, отражаясь от левого и правого зеркал, проецируется на фотолинейку. В этом плече свет проходит через блок гетеродина, задача которого сформировать такой световой пучок, который обеспечивает равномерное освещение фотолинейки.

Воспользовавшись определением динамического диапазона согласно (10), а также соотношением для определения отношения сигнал – шум в гетеродинных системах [13], получим:

$$ДД_1 = 10\lg\frac{2S^2 I_c I_г}{\Delta f_1\{2q[S(I_c + I_г) + I_T] + 4kT^o GF\}} \qquad (11)$$

где S – крутизна характеристики преобразования «интенсивность света – фототок» фотоприемника, q =1,6·10^{-19} Кл – заряд электрона, Δf_1 – полоса рабочих частот каждого фотоприемника, G – проводимость нагрузки фотоприемников, k – постоянная Больцмана, F – коэффициент шума усилителя на выходе фотоприемника, I_C – часть интенсивности света на фотоприемнике, связанная с прохождением через «сигнальное» плечо (плечо интерферометра где установлен АОМ), $I_г$ – часть интенсивности света обусловленное прохождением света через «гетеродинное» плечо интерферометра, T^0 – абсолютная температура, I_T – темновой ток каждого фотоприемника.

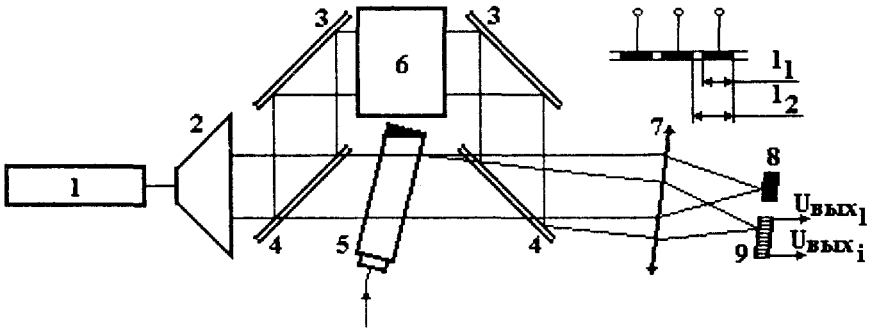


Рис. 10. Интерферометрический акустооптический процессор радиосигналов,1 – лазер, 2 – расширитель лазерного пучка, 3 –левое и правое зеркала, 4 – левое и правое полупрозрачные зеркала, 5 – АОМ, 6 – гетеродин, 7 – фурье – линза, 8 – заглушка, 9 – линейка фотодиодов

Как показали проведенные эксперименты, для обеспечения разрешения по критерию Рэлея двух гармонических сигналов, поданных на вход анализатора спектра, требуется β=1,25 ΔfT фотоприемников (Δf – полоса анализа, T – временная апертура АОМ) при l_1 / l_2=0,15. Откуда необходимая полоса рабочих частот каждого фотоприемника $\Delta f_1 = \beta/(1{,}25T)$. Из приведенной структуры АОФП с оптическим гетеродинированием (АОФП ОГ) видно, что интенсивность I_C можно представить:

$$I_c = nP_л(1-k_1)(1-k_2)K_d'', \qquad (12)$$

где $P_л$ – мощность лазера, k_1 и k_2 – коэффициенты отражения полупрозрачных зеркал, n – коэффициент обусловленный расширением и последующим диафрагмированием светового пучка (для обеспечения неравномерности освещения АОМ пучком с гауссовым распределением интенсивности в пределах 5 %, n=0,4 [20]), K_d'' – коэффициент учитывающий ослабление света при дифракции. Коэффициент K_d'' связан с дифракционной эффективностью K_d, как техническим параметром АОМ, и с характеристиками обрабатываемых сигналов. Поэтому сделаем допущение вида:

$$K_d'' = K_d mp \tag{13}$$

где $m = T'/T$ – коэффициент заполнения апертуры, T' – длительность обрабатываемого сигнала, находящегося в апертуре АОМ, p – коэффициент характеризующий эффективную полосу анализируемого сигнала.

Необходимость использования коэффициента p связана с тем, что при определении динамического диапазона могут использоваться различные тестовые сигналы. При этом в зависимости от ширины спектра сигналов интенсивность света I_c будет регистрироваться различным числом фотоприемников, что повлияет на величину как максимально допустимой мощности радиосигнала на входе процессора, так и на величину минимально допустимой мощности радиосигнала, требуемой для обеспечения заданного отношения сигнал/шум на выходе каждого фотоприемника. В предположении равномерного распределения энергии в спектре тестового сигнала, определим p в виде [18]:

$$p = \frac{\beta}{1{,}25TT'}. \tag{14}$$

Дифракционная эффективность связана с параметрами АОМ и мощностью входного сигнала выражением [10]:

$$K_d = \frac{\pi M_2 k_c P_э L}{\lambda^2 2\cos^2\Theta_Б H} = k_д P_э, \tag{15}$$

где $k_д$ – коэффициент, учитывающий конструктивные особенности АОМ, k_c – коэффициент связи между мощностью анализируемого радиосигнала и акустической мощностью волны распространяющейся по СЗП АОМ, $\Theta_Б$ – угол Брэгга, L и H – длина и высота области АОВ (длина и ширина пьезопреобразователя), λ – длина волны света в среде АОВ, M_2 – акустооптическая добротность среды АОВ, $P_э$ – мощность радиосигнала.

При использовании для крепления электроакустического преобразователя (пьезопреобразователя) к СЗП (кристаллу TeO_2) АОМ термокомпрессионной сваркой [25,26], и при соотношении L/H=1, $k_д$=1,95 Вт$^{-1}$ (из учета что $\cos\Theta_Б^2 \approx 1$, $\lambda = 0{,}63\text{x}10^{-6}$ м), учитывая (12)-(15), интенсивность I_c можно записать в виде:

$$I_c = 0{,}8mP_л(1-k_1)(1-k_2)k_д P_э \beta T'/(T^2\Delta f'). \tag{16}$$

Аналогично определим интенсивность $I_г$:

$$I_г = 0{,}8nP_л k_1 k_2 k_3 \beta[1/(\Delta f T)], \tag{17}$$

где k_3 – коэффициент передачи гетеродинного плеча интерферометра.

В выражении (17) учтено, что интенсивность гетеродинного пучка равномерно распределена между 1,25 $\Delta f T$ фотоприемниками. С учетом принятых выше обозначений, тогда выражение для динамического диапазона АОФП ОГ можно записать в виде:

$$ДД_1 = \frac{1{,}6S^2 n^2 P_л^2 (1-k_1)(1-k_2)k_1 k_2 k_3 k_д P_э \beta T'}{T^2 \Delta f \Delta f' \left\{2q\left[\frac{0{,}85SnP_л\beta(k_1 k_2 k_д T')}{\Delta f' T^2} + \frac{(1-k_1)(1-k_2)k_3}{\Delta f T} + I_T\right] + 4kT^o GF\right\}}. \tag{18}$$

Выражение (18) не учитывает возможность использования фотоприемника с умножением. Это связано с тем, что лавинные фотодиоды (ЛФД) в режиме умножения имеют нелинейную ватт-амперную характеристику [27]:

$$i = \sqrt{(ISU_{пр})/(VR_H)}, \qquad (19)$$

где i – ток диода в режиме умножения, $U_{пр}$ – напряжение пробоя, R_H – сопротивление нагрузки, V – параметр. Для фотодиода ЛФД-2А, экспериментально установленное значение V =3,5.

На частотах до 100 МГц сопротивление нагрузки ЛФД обычно имеет величину несколько сотен Ом – единиц кОм, что при отсутствии режима умножения делает величину последнего члена в знаменателе (18), характеризующего мощность тепловых шумов, на два порядка больше остальных членов (характеризующих мощность дробовых шумов). Таким образом, в режиме ограничения тепловыми шумами, динамический диапазон АОФП ОГ можно определить:

$$ДД_1 = 10\lg\frac{0{,}4n^2S^2P_л^2(1-k_1)(1-k_2)k_1k_2k_3k_\partial P_Э T'}{T^2\Delta f\Delta f' kT^o GF}. \qquad (20)$$

Учитывая, что под знаком логарифма в выражении (20) стоит отношение с/ш, можно вычислить мощность входного сигнала, при котором это отношение равно 1. Для оценочных расчетов примем $T = T'$, $\Delta f' = 2/T$, $k_1 = k_2 = 0{,}5$, k_3=0,7, $S = 0{,}2\ A/Bm$, $G = 10$ (1/Ом), F =3, Δf =25 МГц. Изменение величины мощности $P_{Э\min}$ входного сигнала, обеспечивающего отношение с/ш=1 на входе фотоприемника в зависимости от мощности используемого лазера представлено на рис. 11. Расчет проведен по формуле [24]:

$$P_{Э\min} = 0{,}76x10^{-18}\,\Delta f / P_л^2.$$

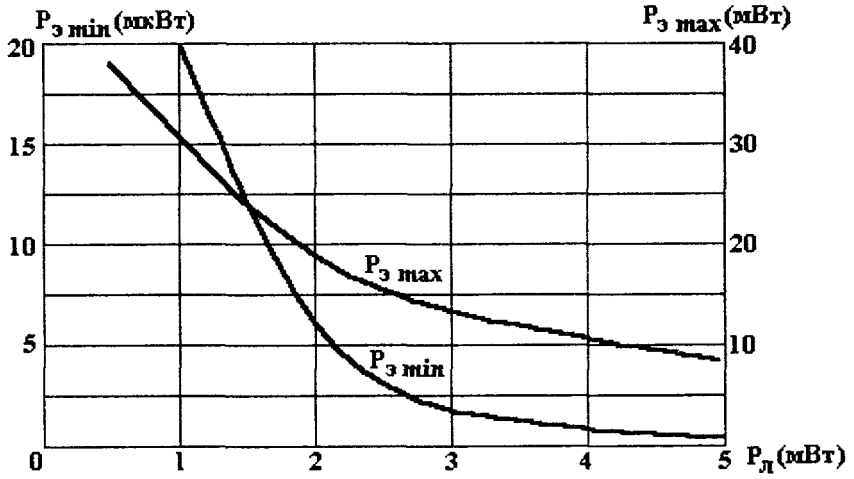


Рис. 11. Максимальная и минимальная мощности входных сигналов АОФП ОГ, в зависимости от мощности лазера

При оценке динамического диапазона АОФП ОГ по двухсигнальному методу, фактором, ограничивающим максимальную мощность входного сигнала является наличие в спектре сигнала интермодуляционных составляющих J, как функции коэффициента фазовой модуляции света a_0 в АОМ при бреговском режиме дифракции. Зависимость которых в малосигнальном приближении (при условии что оба гармонических сигнала на входе АОМ имеют одинаковые амплитуды), можно представить [21]:

$$J = \frac{1}{36}\left(\frac{a_0}{2}\right)^2. \qquad (21)$$

Для определения максимально допустимой мощности выходного сигнала АОФП ОГ, воспользуемся выше приведенными соображениями, учитывая, что в выражении (15) величина $k_\partial P_Э = (0{,}5a_0)^2$. Минимально допустимой электрической мощностью будем считать такую $P'_{Э\max}$, при которой отношение с/ш для интермодуляционных составляющих третьего порядка на выходе фотоприемника не превысит единицу, причем в данном случае $P'_{Э\max}$ - суммарная мощность обеих гармо-

ник. Оценки показывают [21], что для значений a_0 <0,5 амплитудные характеристики для одно- и двухчастотных режимов хорошо апроксимируются первым членом ряда $a_0/2$ (ошибка менее 3%). Таким образом, задача сводится к нахождению такой величины a_0 (и соответственно мощности $P'_{Э\max}$) при которой интенсивность света на фотоприемнике, связанная с a_0 выражением (21), обеспечивается при значениях $k_\partial P_{Э\min}$, вычисленных ранее. Результаты вычислений представлены на рис. 12 причем $P_{Э\max}$ на этом рисунке – мощность одной из гармоник. Расчет произведен по формуле:

$$P_{Э\max} = 1{,}89x10^{-6}(\Delta f / P_л^2)^{1/3}.$$

Учитывая ранее принятые обозначения, выражение (20) можно записать в виде:

$$ДД_1 = 180 + 10\lg 2{,}65\frac{P_л^2 P_Э T'}{T^2 \Delta f \Delta f'}. \qquad (22)$$

С учетом того, что ранее была определена связь между максимально допустимой мощностью на входе устройства и его параметрами, можно найти зависимость между величиной динамического диапазона и параметрами конкретного устройства при двухсигнальном методе определения:

$$ДД = 124 + 10\lg P_л^{4/3}\Delta f^{-2/3}. \qquad (23)$$

Результаты расчета динамического диапазона в зависимости от мощности лазера представлены на рис. 12 (сплошная кривая). Расчет проведен для значения Δf =25 МГц, по формуле $ДД = 75{,}2 + 10\lg P_л^{4/3}$.

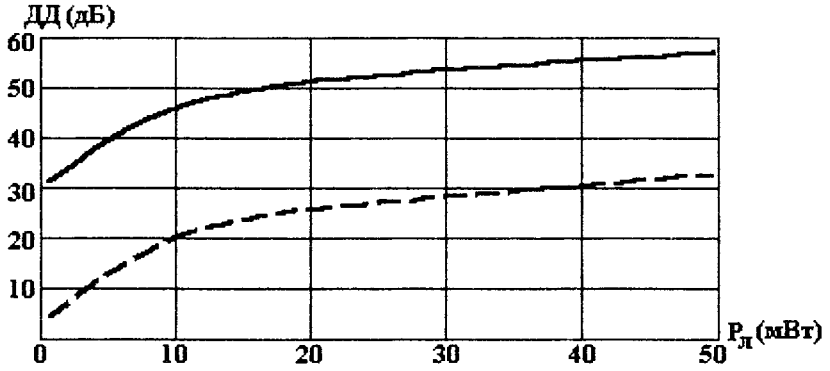


Рис. 12. Динамический диапазон АОФП ОГ в зависимости от мощности лазера

Использование тестового сигнала типа «белый шум», у которого равномерен энергетический спектр в полосе анализа, также позволяет достаточно объективно оценить динамический диапазон АОФП. Из выражения (22) для такого тестового сигнала ($T = T'$, $\Delta f = \Delta f'$), нетрудно получить:

$$ДД_1 = 180 + 10\lg\frac{2{,}65P_л^2 P_Э}{\Delta f^2 T}. \qquad (24)$$

Ограничив максимально допустимую мощность той же величиной, что и в предыдущем случае:

$$ДД = 22{,}8 + 10\lg(P_Л^{4.3}\Delta f^{1/3}). \qquad (25)$$

На рис. 12 пунктирной линией показаны результаты расчета зависимости динамического диапазона от мощности лазера для Δf =25 МГц, ΔfT =1000 (расчет проведен по формуле $ДД = 47{,}4 + 10\lg P_Л^{4/3}$). Как видно из графика, использование тестового сигнала типа «белый шум», при данных условиях, приводит к уменьшению динамического диапазона до уровня 27,8 дБ.

3. Акустооптические модуляторы

Предлагаются технические характеристики акустооптических модуляторов, изготовленных коллективом авторов (см. табл. 1.1), а также характеристики изделий, созданных впервые по инициативным разработкам, стимулированным научно-техническим советом НИИКА (г. Донецк).

3.1. Акустооптический модулятор (АОМ-3) на хлориде ртути (Hg_2Cl_2)

Апертура АОМ выбиралась из соображений, чтобы разность между верхней и нижней частотами внутри рабочей полосы отличалась не более чем в 3 раза. Количество разрешаемых элементов N, которое может обеспечить акустооптическая ячейка (АОЯ) акустооптического модулятора, найдено из условий: $N < 1{,}5\Lambda / \Gamma\Lambda_1^2$, $N = D/2\Lambda$, $N < (L/2\Lambda)^2$, где: Г – коэффициент затухания акустической волны в дБ, отнесенный к единице длинны на частоте 1 ГГц, Λ_1 -длина упругой волны на частоте 1 ГГц.

На рис. 13 показано, что для апертуры D=5 см (τ=145 мкс), фактором ограничивающим разрешающую способность, является затухание. Из полученных графиков следует, что для $\Delta f\tau$ >3000, центральная частота АОМ-3 не может превышать 40 МГц. На рис. 13. кривые 1 – 12, построены соответственно для апертур D =1,5 мм; 2 мм; 10 см; 9 см; 8 см; 7см; 6 см; 5 см; 4 см; 3 см; 2 см; 1 см. Изготовленный АОМ-3 имел f_0=40 МГц, ширину полосы –20 МГц, разрешающую способность τ=150 мкс (~7 кГц). При заданных f_0 -центральной частоте и Δf - полосе АОМ, длина АОВ – L, определена в соответствии с выражением: $(3{,}6L_0 / L)^{0,5} = B\Delta f / f_0$=2.14 мм, где $L_0 = n\Lambda_0^2 \cos\Theta / \lambda$. Высота АОВ равна H=4 мм, что при s=8,56 мм^2 позволило подать на пьезопреобразователь из ниобата лития электрическую мощность управляющего радиосигнала до 1 Вт.

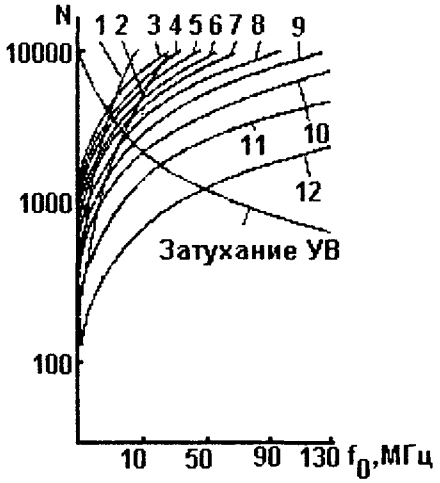


Рис. 13. Зависимость разрешающей способности АОМ-3 от центральной частоты

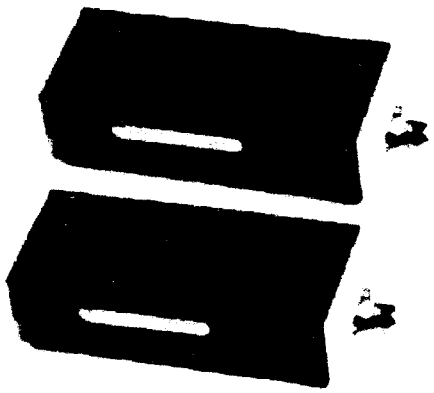


Рис. 14. Образцы АОМ-3

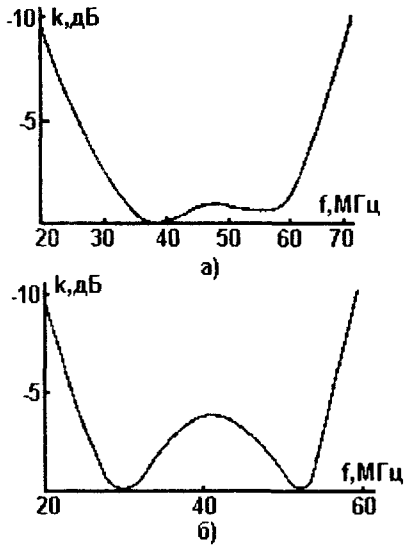


Рис. 15. Рассчитанный коэффициент электрической связи ППр с согласующим слоем на основе индия (а) и свинца (б)

Структура связующих слоев (СС) пьезопреобразователя (ППр) с СЗП определялась по методике [29] путем моделирования на ЭВМ. Необходимость синтеза новых СС обусловлена высокой химической активностью кристалла Hg_2Cl_2. Были предложены две структуры с СС на основе индия и свинца (расчетные частотные зависимости коэффициента электрической связи для таких структур представлены на рис. 15, а экспериментальные ЭОЧХ одного из АОМ на основе Hg_2Cl_2 – на рис. 16). При использовании ниобата лития в качестве ППр и внешнего электрода из золота рассчитаны резонансные толщины ППр в соответствии с методикой изложенной в [29]. Приведенные частотные зависимости коэффициента электрической связи показывают, что In – структура позволяет получить провал в характеристике не более 1 дБ, в то время как Pb – структура, около 4 дБ. При этом необходимо отметить что, несмотря на то, что первая обеспечивает лучшее согласование, вторая – проще технически реализуема.

Исследование основной характеристики АОМ, электрооптической частотной характеристики (ЭОЧХ) проводилось

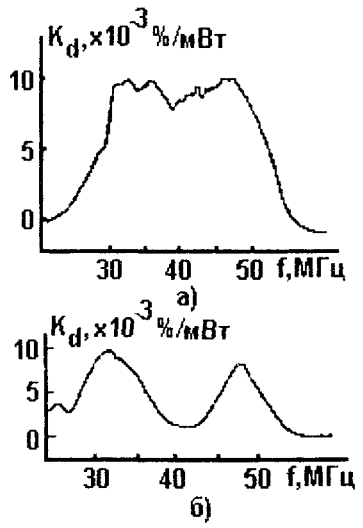


Рис.16. Экспериментальные ЭОЧХ одного из образцов АОМ-3 с согласующим слоем (СС) на основе индия (а) и свинца (б)

согласно методики, разработанной в [30]. Полученная ЭОЧХ одного из образцов АОМ-3 (рис. 14), представлена на рис. 16. Как и ожидалось ЭОЧХ АОМ-3, где в качестве связующей согласующей структуры использовался свинец, оказалась более изрезанной. Для АОМ-3, где СС на основе индия, при полосе 20 МГц, провал составляет не более –3 дБ. Электро-оптическая эффективность АОМ-3 достигает $10 \cdot 10^{-3}$ %/мВт, что примерно в 1,5 раза меньше расчетной.

3.2. Акустооптический модулятор (АОМ-4) на основе фосфида галлия

Для изготовления акустооптических модуляторов условной серии АОМ-4, использовались монокристаллы GaP отечественного производства (Завод сверхчистых металлов, г. Светловодск, Кировоградской обл.). Результаты экспериментальных исследований акустооптических параметров монокристаллов GaP, при распространении упругой волны вдоль [110], представленны в табл. 1.2. Экспериментально, было установлено что в GaP, при изотропной дифракции на сдвиговых акустических волнах, распространяющихся вдоль [110], направление поляризации дифрагированной световой волны изменяется на 90^0 относительно падающей волны. Самое сильное АОВ наблюдается на продольной акустической волне, однако, при этом отсутствует поворот направления поляризации. Эффективная фотоупругая постоянная для более быстрой сдвиговой волны составляет 1/3 этого параметра для продольной волны.

Таблица 1.2. Акустооптические параметры GaP для упругой волны вдоль [110]

Тип акустической волны	Скорость акустической волны, м/с	Поляризация падающей световой волны	Направление распространения световой волны	Поляризация рассеянного света	Эффективная фотоупругая постоянная
L	6423±10	∥	[111]	∥	0,21
S	3078±10	⊥	[111]	∥	0,03
S	4132±10	⊥	[111]	[∥	0,07
L	6461±10	∥	[110]	∥	0,2
S	6460±10	∥	[110]	∥	0,6
L	4126±10	⊥	[110]	⊥	0.18
S	4135±10	⊥	[110]	∥	0,065



Рис. 17. Акустооптические модуляторы серии АОМ-4

В результате моделирования, используя акустооптические параметры GaP [23], была создана серия модуляторов типа АОМ-4, где в качестве СЗП использовался данный монокристалл (рис. 17). В качестве ЭАП использовалась пленка ZnO, возбуждающая в СЗП продольную акустическую волну. Напыление пленки проводилось на установке магнетронного напыления типа «Катод-1 М», путем распыления Zn в атмосфере O_2. Номинальная скорость напыления $(2,5\text{-}4,5) \cdot 10^{-2}$ мкм/мин. При резонансной частоте 3 ГГц, толщина ее составляла 0,96 мкм. Текстура возбуждала продольные колебания в направлении [001], при $k_{ЭМ}$ =0,08. Было установлено, что частичная разориентация текстур зависит от температуры напыления пленки а также от местоположения и ориентации подложки (GaP) в установке напыления (рис.18,19). Электроды на ППр созданы методом фотолитографии. Расчетная и экспериментальная ЭОАЧХ АОМ-4 представлены на рис. 20 и 21.

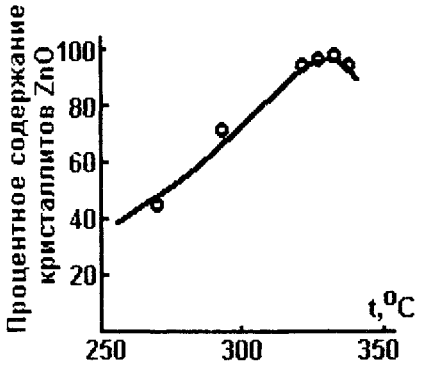


Рис. 18. Зависимость процентного содержания кристаллитов с нормальной ориентацией от температуры подложки

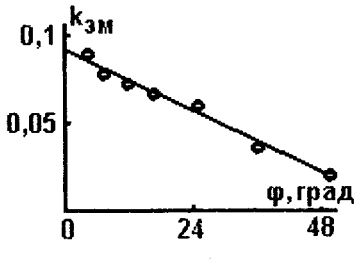


Рис. 19. Зависимость коэффициента электромеханической связи ППр на основе ZnO от угла напыления на подложку

ЭОАЧХ АОМ-4 имеют ширину полосы пропускания на уровне –3 дБ, равную 2 и 3,1 ГГц при центральных частотах

3 и 4 ГГц (относительная ширина полосы 67 и 77% соответственно). Максимальное значение частотной зависимости электро-оптической эффективности АОМ-4 с полосой пропускания 2 ГГц, равно 2,5 %/мВт, с полосой пропускания 3,1 ГГц – 1,8 %/мВт.

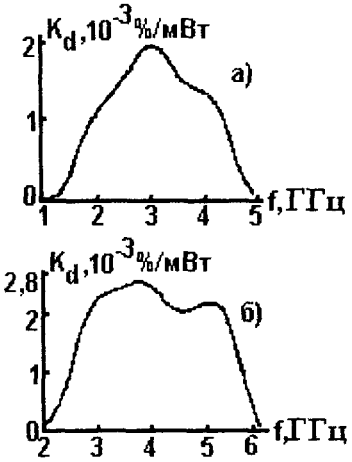


Рис. 20. Расчетная ЭОАЧХ АОМ-4

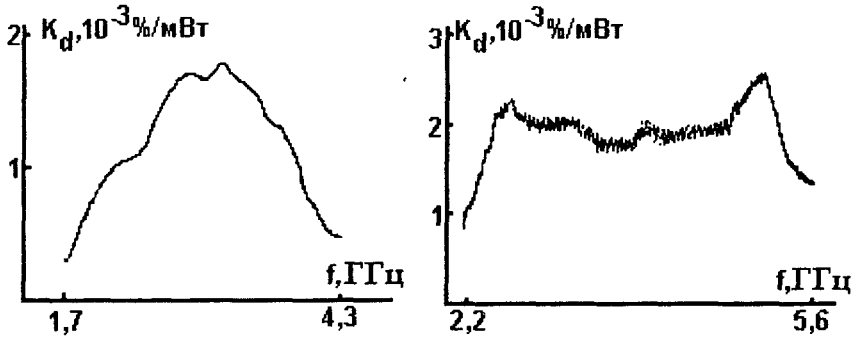


Рис. 21. Экспериментальная ЭОАЧХ АОМ – 4

4. Широкополосный усилитель управления АОМ АОФП

Общие требования, предъявляемые к блокам первичной обработки вычислительных средств информационно-измерительных систем, были отражены в [9]. По существу, структура, показанная на рис. 1, отличается от [5] тем, что понимается под источником управляющего радиосигнала для АОМ АОФП. Им является, как правило, широкополосный усилитель (ШУ). Представление о необходимом динамическом диапазоне АОФП для специальных информационно-измерительных систем (СИИС) приведено в работе [9]. Следовательно, как элемент структуры определяющий эффективность системы в целом, ШУ должен обеспечивать полосу частот одновременного анализа (не менее 100 МГц), иметь малый уровень ложных сигналов ($\leq$ -30...40 дБ), достаточную мощность выходного радиосигнала ($\geq$ 300 мВт), позволяющую скомпенсировать потери на преобразование радиосигнала в акустическую волну пьезопреобразователем. В связи с тем, что современные АОФП могут быть многоканальными, большое значение приобретает стационарно потребляемая усилителем мощность ($P_{потр}$) и его массогабаритные показатели. Перечень необходимых характеристик ШУ, для применений в АОФП СИИС, сформулирован в табл. 1.3 [5].

Таблица 1.3. Оптимальные характеристики широкополосных усилителей для АОФП

Параметр	Значение
Максимальная мощность гармонического выходного сигнала на нагрузке R_H =50 Ом	$P_{p\max}$ =0,5...1,5 Вт
Входное сопротивление	$R_{вх}$ =50 Ом
Коэффициент усиления по мощности	K_p =70 дБ
Максимальная рабочая частота	$f_{p\max} \geq$ 30 МГц
Неравномерность АЧХ в полосе рабочих частот	$\Delta a_p \leq$ 2 дБ
Уровень интермодуляционных искажений при двухчастотном режиме работы в полном динамическом диапазоне выходных амплитуд в полосе частот 0... $f_{p\max}$	$\leq$ 30 дБ
Ширина полосы пропускания, по уровню неравномерности	$\pm$ 20%/f_0

Для исключения нелинейных искажений гармонического выходного сигнала, возникающих при ограничении максимальной скорости нарастания выходного напряжения, широкополосный усилитель (ШУ)

должен обладать граничной частотой пропускания при полной мощности $f_{гр} > f_{p\,\max} = 30$ МГц. При этом максимальная амплитуда выходного напряжения ШУ ($U_{вых\,\max}$) должна быть равна такой величине, чтобы при допустимом в полосе рабочих частот подъеме АЧХ (≤ 2 дБ) отсутствовало ограничение выходного сигнала по амплитуде. Так как $P_{p\,\max} = 1$ Вт, при $R_H = 50$ Ом и $U_{p\,\max} = \sqrt{2P_{p\,\max}R_H} = \pm 10$ В, то величина $U_{вых\,\max}$ широкополосного усилителя должна быть не менее ± 12 В. При выборе максимального выходного тока $I_{вых\,\max}$ ШУ, необходимо учитывать емкостной характер нагрузки. Так при $C_н = 10$ пФ, величина $I_{вых\,\max}$ может быть найдена из соотношения:

$$I_{вых\,\max} \geq \pm U_{вых\,\max} / [R_H \| 1/(2\pi f_{гр} C_н)] = 300\ mA. \qquad (26)$$

Параметры $f_{гр}$ и $U_{вых\,\max}$ на выходе ШУ, однозначно определяют требуемую максимальную скорость нарастания гармонического выходного напряжения усилителя:

$$V_{вых\,\max} = 2\pi U_{вых\,\max} f_{гр}. \qquad (27)$$

Подставляя в (27) значения $U_{вых\,\max} \geq 12$ В и $f_{гр} \geq 30$ МГц, найдем условие линейности ШУ в полосе рабочих частот $V_{вых\,\max} \geq 2261$ В/мкс. Для того чтобы в усилителе при $K_{ос} = 100$ на частоте $f_{p\,\max}$ обеспечить хотя бы минимальную величину глубины общей отрицательной обратной связи $F_{гн} = 1 + \gamma K_{бс}(f) = 2..3$, требуемую для получения на частоте $f_{p\,\max}$ приемлемых значений нестабильности $K_{ос}$, фазового сдвига и уровня нелинейных искажений, усилитель должен иметь верхнюю граничную частоту по уровню – 3 дБ от $K_{ос} f_в \sim 80...120$ МГц, что соответствует площади усиления $GB = K_{ос}(f_в) f_в \approx 13...15$ ГГц.

Данные по быстродействующим операционным усилителям (БОУ) иностранного производства показывают, что наиболее широкополосные из них при $I_{вых\,\max} \geq 200$ мА имеют площадь усиления 1...6 ГГц. Кроме того, величины $U_{вых\,\max}$, $f_{гр}$ и GB для БОУ, как правило, обратнопропорцианальны величине максимального выходного тока $I_{вых\,\max}$. Это объясняется тем, что для увеличения выходной мощности БОУ в его выходном двухтактном эмиттерном повторителе напряжения (ПН) используются мощные высокочастотные транзисторы разного типа проводимости с высокими значениями предельно допустимых токов коллектора $I_{к\,\max}$, величины которых прямопропорциональны площади переходов коллектор-база или затвор-канал, данных транзисторов, а следовательно и емкости этих транзисторов.

Возрастание $C_{вх}$ выходного двухтактного ПН приводит к ухудшению устойчивости работы БОУ на высоких частотах, которую в этом случае можно улучшить только снижением величины GB. В то же время при заданных значениях максимальных приращений выходного тока предыдущего каскада БОУ, управляющего двухтактным ПН, при увеличении $C_{вх}$, наблюдается снижение $U_{вых\,\max}$ и $f_{гр}$.

В процессе синтеза схемы ШУ было установлено, что соображениям, изложенным выше, наиболее всего соответствует структура усилителя, приведенная в [27], принципиальная схема которого показана на рис. 22.

Микросборки МС1, МС3, МС4 представляют собой широкополосные усилители на транзисторах КТ640А, коэффициент усиления – 22 дБ, полоса пропускания 0,1-1000 МГц. Коэффициент шума микросборок МС1, МС3, МС4 – не более 4 дБ. Для возможности использования усилителя в многоканальных акустооптических анализаторах спектра, в состав усилителя введен широкополосный фазовращатель, реализованный на микросборке МС2, принципиальная схема которого представлена на рис.23.

В качестве активных элементов МС2 используются малошумящие транзисторы КТ3101А. Малое выходное сопротивление развязывающих эмиттерных повторителей на VT2 и VT3 обеспечивает постоянство амплитудно-фазовой характеристики при регулировке фазы на 30^0 во всей рабочей полосе частот. Фазовращатель вносит затухание около 4-6 дБ. Выходной усилитель мощности собран по схеме с последовательным возбуждением, имеет усиление порядка 16 дБ и развивает мощность 1,5 Вт на нагрузке 50

Ом. Общий коэффициент широкополосного усилителя составляет 64 дБ. Предусмотрена ручная регулировка усиления глубиной 10 дБ, при подаче на Вх3, напряжения ± 0,1 В. Амплитудная и фазовая характеристика усилителя приведена на рис. 24, амплитудно – частотная и фазочастотная характеристики показаны на рис. 25. При выходной мощности до 0,5 Вт, максимальный уход фазы между входом и выходом не более 8^0. Неравномерность АЧХ в полосе 10-220 МГц, не более 2 дБ. Неравномерность увеличивается с введением регулировки усиления по Вх3.

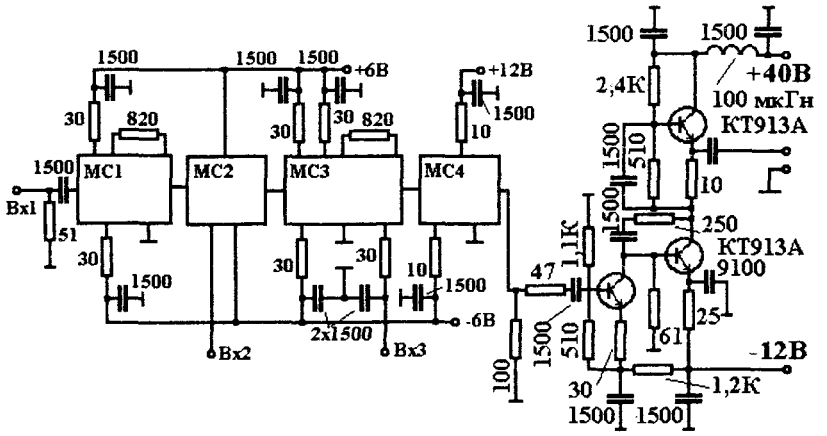


Рис. 22. Принципиальная схема широкополосного усилителя для АОФП

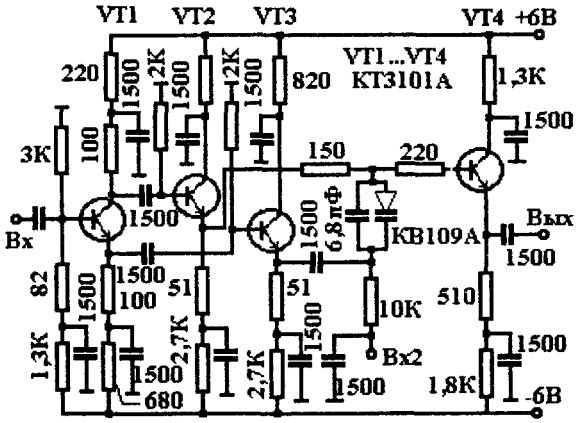


Рис. 23. Принципиальная схем фазовращателя широкополосного усилителя

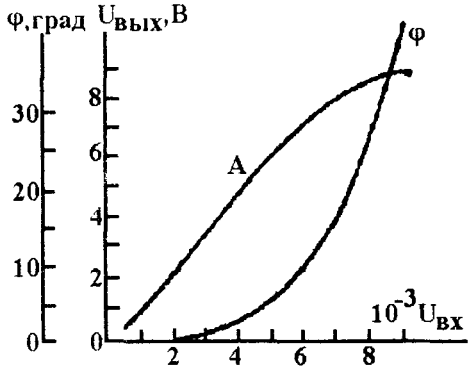


Рис. 24. Амплитудная и фазовая характеристики ШУ

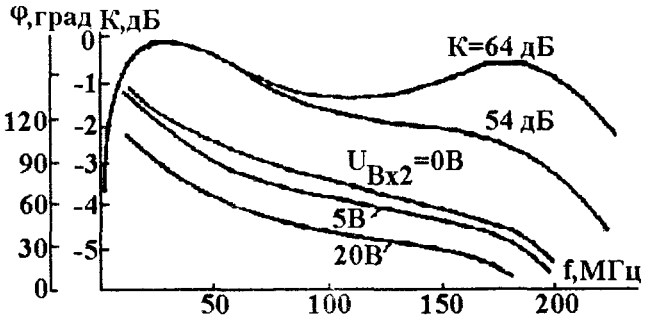


Рис. 25. Амплитудно-частотная и фазо-частотная характеристики ШУ

Выводы.

Одним из направлений решения проблемы снижения энергозатрат и массогабаритов современной радиоэлектронной аппаратуры информационно-измерительных систем является переход при её проектировании на принципы функциональной электроники.

Среди устройств функциональной электроники известны акустооптические Фурье-процессры обработки радиосигналов в реальном масштабе времени, которые бывают с временным и пространственным интегрированием. Для вычислительных операций спектрального анализа используются процессоры с пространственным интегрированием. Структурно, АОФП разделяют на процессоры с прямым преобразованием и интерференционные (с оптическим гетеродинированием). Для вычислений мгновенного комплексного спектра РС наиболее подходят структуры АОФП ОГ.

В настоящий момент, цикл проведенных исследований экспериментальной элементной базы АОФП ОГ позволяет прогнозировать внедрение их в производство в ближайшем будущем.

Вместе с тем, остаются не выясненными вопросы искажений информации в АОФП ОГ, способность их обрабатывать спектры перспективных сигналов (шумоподобных, с программной перестройкой радиочастоты, импульсно-фазокодоманипулированных и др.), возможности по совершенствованию структуры с целью повышения их производительности.

РЕЗЮМЕ

Розглядаються структури пристроїв функціональної електроніки - акустооптичних Фур'є-процесорів обробки радіосигналів із просторовим інтегруванням прямого перетворення й з оптичним гетеродинуванням. Пропонується перелік технічних характеристик пристроїв. Представлено результати експериментальних досліджень процесорів та їх елементної бази.

SUMMARY

The structures of devices of functional electronics – acoustooptical Fouriers-processors of radiosignal processing with a space integration of direct transformation and with optical heterodyning are observed. The list of technical characteristics of the devices is offered. The experimental results of the processors and their element base investigation are presented.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Крыщенко А.Н., Плыс М.В., Белик Т.В. Устройства обработки сигналов на принципах функциональной электроники // Вісник Донецького університету. Серія А «Природничі науки». – 2007. – №2. – С. 161-185.
2. Федотов Я.А. Функциональная электроника. – М.: Высшая школа, 2000.
3. Щука А.А. Электроника. Под ред. проф. А.С. Сигова. – СПб.: БХВ-Петербург, 2006.
4. Белик Т.В. Оптоэлектронные процессоры радиосигналов. Труды VII международной научно-практической конференции «Современные информационные и электронные технологии», Т.1, г. Одесса, 22-26 мая 2006. – С. 232.
5. Данилов В.В. Акустооптические устройства управления лазерным пучком систем оптоэлектронной обработки радиосигналов. Радиотехника. Всеукраинский научно-техни-ческий сборник. – 1999. – №111. – С. 136-142.
6. Данилов В.В. Основи створення пристроїв вводу, розущільнення й адресації потоків інформації для оптичних обчислювальних засобів. Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук. Національний технічний університет «Київський політехнічний інститут». 2003.
7. Perfection of system radioelectronic struggle for planes of USA // Journal of Electronic Defense. – 1991. – VI. – V.1. – №6. – P. 18-23.
8. The plans of system engineering radioelectronic struggle USA // Journal of Electronic Defense. – 1991. – VIII. – V.14. – №8. – P. 17-26.
9. Акустооптические многоканальные разведывательные приемники. Экспресс-информация. Радиоэлектроника за рубежом. – 1987. – №15(1091). – С. 8-11.
10. Данилов В.В. Физические основы построения оптических процессоров обработки радиосигналов // Радиотехника: Всеукр. науч. – Техн. сб. – 2001. -№120. – С. 140-148.
11. Данилов В.В. Акустооптический анализатор спектра // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2000. – №5-6. – С.25-28.
12. Голденберг Л.М., Матюшкин Б.Д., Поляк М.Н. Цифровая обработка сигналов. Справочник. – М.: Радио и связь. – 1985.
13. Рабинер Л., Гоулд Б. Теория и применение цифровой обработки сигналов. – М.: Мир, 1978.
14. Данилов В.В., Роганов Л.М. Процессор радиосигналов на основе волоконно-оптической матрицы // Тезисы докладов VI-й международной технической конференции «ВОЛСПИ-95». – Запорожье, 1995. – С.16-17.
15. 1000000:1 optical dynamic range *PHOTOFET*^{CM}. CCD Image Sensor DALSA INC. – 2006.
16. Рубичев Н.А. Оценка и измерение искажений радиосигналов. – М.: Сов. Радио, 1978.
17. Розенберг В.Я. Введение в теорию точности измерительных систем. – М.: Сов. Радио, 1975.
18. Розенберг В.Я. Радиотехнические методы измерения параметров процессов и систем. – М.: Издательство Комитета стандартов, мер и измерительных приборов при Совете Министров СССР, 1970.
19. Андреев А.А., Гусев О.Б., Данилов В.В., Литвиненко В.И., Молоток В.В., Роганов Л.М. Акустооптический анализатор спектра // Приборы и техника эксперимента. – 1992. – №6. – С. 205.
20. Белик Т.В., Данилов В.В. Анализ спектров сигналов акустооптическим процессором // Вісник Донецького університету. Серія А «Природничі науки». – 2006. – №2. – С. 183-188.
21. Van der Lugt A. Interferometric spectrum analyzer // Applied Optics. – 1981. – V.20. – №16. – P. 2770-2779.

22. Hotz D.F. Bulk acoustooptic signal processor for continuous Fourier transforms // Applied Optics. – 1984. – V.23. – №10. – P. 242-245.
23. Yakab L., Richter P. Scanning acoustooptic spectrum analyzer. Proceedings SPIE. Advances in Optical Information Processing IV. – 1990. – V. 1296. – P. 242-245.
24. Данилов В.В. Фотосчитывание спектральных распределений радиосигналов в акустооптическом анализаторе спектра // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2001. – № 4-5. – С. 16-20.
25. Белик Т.В., Литвиненко В.И., Роганов Л.М. и др. Устройство диффузионной сварки в вакууме. Информационно-управляющие и вычислительные комплексы на основе новых технологий. Тезисы докладов Всероссийской научно-технической конференции с международным участием. – С.-Петербург, 1992. – С.137.
26. Данилов В.В. Установка диффузионной термокомпрессионной сварки, Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 1999. – №5-6. – С.28-30.
27. Гальяров Р.М., Карп Ш. Оптическая связь. – М.: Связь, 1978.
28. Воронкова Е.М., Гречушников Б.А., Дистлер Г.И. и др. Оптические материалы для инфракрасной техники. – Москва: Наука, 1965.
29. Данилов В.В., Иванов С.В. Моделирование акустически нагруженного пьезопреобразователя акустооптической ячейки // Радиотехника: Всеукр. науч.-техн. сб. – 2000. – №115. – С. 66-70.
30. Данилов В.В. Основы метрологического контроля технических характеристик акустооптических устройств // Радиотехника. Всеукраинский научно-технический сборник. – 2002. – №124. – С. 148-157.

Надійшла до редакції 12.11.2007 р.

УДК 622.621.928.8

ИССЛЕДОВАНИЕ УЛАВЛИВАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ МНОГОУРОВНЕВЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ МАГНИТНЫХ СЕПАРАТОРОВ.

Ю.И.Горобец, С.В.Горобец**, Ю.А.Легенький, Ю.Н.Пименов,*
**Институт магнетизма НАН Украины,*
***Национальный технический университет Украины «КПИ»*

Введение.

Магнитные устройства широко применяются для очистки и сепарации рабочих сред (сыпучих, жидких, газообразных). При этом в связи с повышением требований к качеству очистки, наиболее широко используются магнитные сепараторы с высокоградиентными ферромагнитными насадками (ВГФН) – ферромагнитными элементами различной формы (различные сетки, стружка, вата из проволоки и т.п.), помещенными в рабочий объем магнитного сепаратора (МС) [1-3]. Для расширения сферы применения высокоградиентных магнитных сепараторов (ВГМС) в работах [4-6] предлагается использовать многоуровневые ВГФН. Многоуровневые ВГФН представляют собой ферромагнитную насадку с нанесенным на нее вторым уровнем, например, нанесение на сетку, проволоку и т.п. более мелкодисперсных ферромагнитных частиц сферической, игольчатой и др. форм. Методы получения многоуровневых ВГФН описаны в работах [6-8]. В работах [7-8] исследованы закономерности улавливания парамагнитных частиц двухуровневыми насадками «ФМ шарики на ФМ пластине». Однако широкое применение ферромагнитных сеток в качестве ВГФН для очистки рабочих сред от железосодержащих примесей [9-11] делает актуальными исследования улавливающей способности таких насадок с использованием ферромагнитных микрочастиц в качестве второго уровня.

Существующие теоретические разработки описывают работу ферромагнитных насадок в режиме намагниченности насадки до состояния насыщения, в то время как в реальных условиях магнитные поля, создаваемые магнитными системами сепараторов не достигают таких напряженностей, особенно для МС с высокой пропускной способностью. Поэтому экспериментальные исследования улавливающих способностей ВГФН, при различных величинах намагничивающего внешнего магнитного поля являются актуальными, как для определения эффективности таких ВГМС и практического использования многоуровневых ВГФН, так и для построения теоретических моделей их работы. Таким образом, целью данной работы является исследование многоуровневых ВГФН, полученных на основе ферромагнитной сетки, и ферромагнитных элементов с различными параметрами, моделирующих работу сеточных ферромагнитных насадок, при улавливании мелкодисперсных примесей для оптимизации работы сепарирующих элементов при малых полях намагничивания.

Методика определения эффективности улавливания магнитных примесей сепарирующими насадками.

При исследовании улавливающих способностей ВГФН сложной конфигурации (типа сетки) применение метода визуального измерения геометрических характеристик кластеров захваченных частиц, применявшегося в работах [7-8], является невозможным. Поэтому был разработан макет установки и отработана методика определения улавливающей способности ВГФН сложной конфигурации при улавливании микрочастиц магнитных примесей. Эта методика основана на пропускании через сепарирующую систему, содержащую испытуемую ВГФН, определенного количества жидкости, содержащей заданное количество примеси, а затем сборе и взвешивании массы тех частиц примеси, которые прошли через сепаратор и тех, которые осели на высокоградиентной ферромагнитной насадке. Блок схема установки представлена на рисунке 1. Установка содержит емкость (1), в которую заливается модельная жидкость, содержащая частицы загрязнителя. Для поддержания частиц во взвешенном состоянии используется устройство (2), представляющее собой механическую мешалку, приводимую во вращение электродвигателем. Жидкость с загрязнителем поступает в кювету (5), в которой располагается ВГФН (6). В качестве сепарирующего элемента можно закреплять ВГФН сложной конфигурации. Для равномерного обтекания жидкостью всей поверхности сепарирующего элемента модельная жидкость подается в кювету снизу, при этом она заполняет всю площадь поперечного сечения кюветы (5). Перекрывание доступа жидкости в кювету осуществляется кранами (3) и (4). Жидкость, прошедшая через магнитный сепаратор поступает в приемную камеру (8). Кран (7) служит для прекращения процесса. Захват примесей на ферромагнитную насадку (6), осуществляется за счет воздействия на нее магнитного поля, создаваемого магнитной системой (9), которая питается от источника регулируемого постоянного напряжения (11). Напряженность магнитного поля контролируется по величине электрического тока, проходящего через намагничивающие катушки. Последовательность операций для определения улавливающей способности

© Горобец Ю.И., Горобец С.В., Легенький Ю.А., Пименов Ю.Н.

испытуемых ВГФН заключалась в следующем. Модельная жидкость заливалась в емкость (1) и включалось перемешивающее устройство. В качестве модельной жидкости использовалась вода с внесенным в нее порошком феррита магния (относительная начальная магнитная проницаемость $\mu_н$=36 [12]), дисперсностью ≈ 1-10 мкм с концентрацией 1 г/л. Затем открывались краны (3), (4) и (7) и при включенном магнитном поле, жидкость протекала через кювету (5), с находящейся в ней ВГФН. Процесс проходил до момента, пока в приемной камере (8) набирался заданный объем отсепарированной жидкости $V_{сл}$, содержащий прошедшие через сепаратор частицы массой $m_{сл}$. После этого краны (3), (4) и (7) закрывались, а приемная камера (8) ставилась для отстаивания примесей. Примеси, оставшиеся внутри корпуса сепаратора массой $m_{см}$ смывали чистой водой в отдельный сосуд (при выключенном магнитном поле) и также оставляли для отстаивания.

После отстаивания примесь извлекалась из сосудов намагничивающимся стержнем с конусным наконечником и переносилась на специально подготовленные (предварительно взвешенные) кюветы. После этого пробы с уловленными примесями массой $m_{см}$ и примесями массой $m_{сл}$, прошедшими через сепаратор, высушивались в течение суток в сушильной камере при температуре T = 100°C. В дальнейшем производилось взвешивание полученных навесок примесей $m_{сл}$ и $m_{см}$. Эти данные являлись измеряемыми в каждом опыте параметрами, по которым рассчитывалась масса частиц примеси $m_ф$, захваченных непосредственно на испытуемой ВГФН.

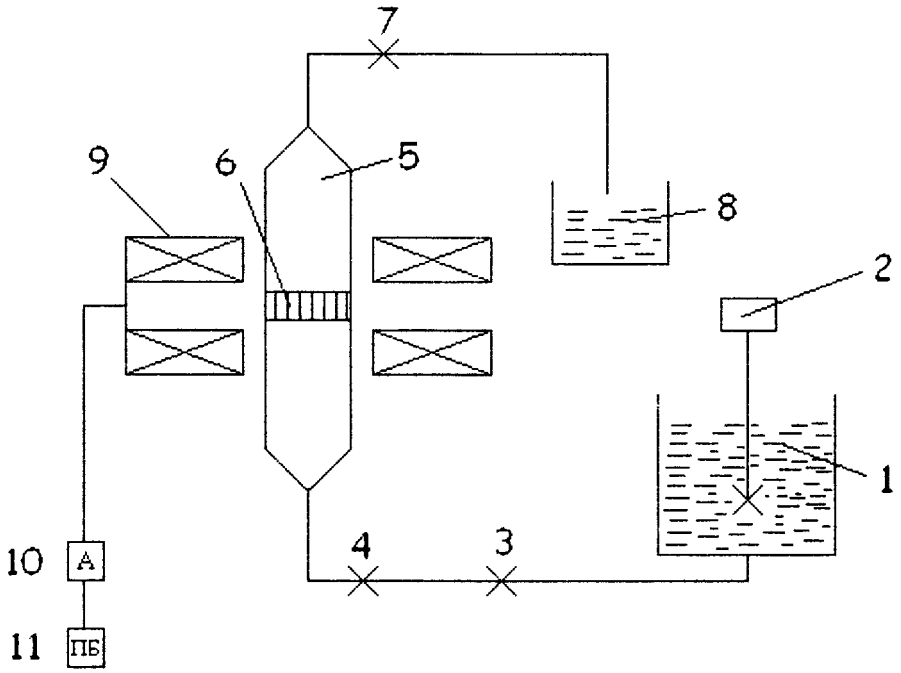


Рис. 1. Блок-схема установки для изучения улавливающей способности ВГФН для ферромагнитных примесей. 1– емкость с модельной жидкостью, 2 – устройство для перемешивания модельной жидкости, 3 и 4 – входные краны, 5 – кювета, 6 – ВГФН, 7 – выпускной кран, 8 – приемная камера, 9 – магнитная система, 10 – амперметр, 11 – блок питания магнитной системы

Массу частиц примесей $m_ф$, захваченных на ВГФН, вычисляли по формуле

$$m_ф = m_{см} - \frac{m_{см} + m_{сл}}{V_ф + V_{сл}} \cdot V_ф \qquad (1)$$

где $m_ф$ – масса частиц примесей, захваченных на ВГФН, $m_{сл}$ – масса частиц примесей, прошедших через магнитный сепаратор и собранных в приемном сосуде (8), $m_{см}$ – масса частиц оставшихся в рабочем объеме сепаратора после прохождения через сепаратор заданного объема модельной жидкости, $V_Ф$ – внутренний объем корпуса сепаратора, $V_{сл}$ – объем жидкости, собранной в приемной сосуде (8) в данном опыте.

Используя выше описанную методику, были проведены исследования улавливающей способности сеточных ВГФН и двухуровневых ВГФН «ФМ шарики на ФМ пластине» при улавливании ферромагнитных примесей.

Исследование улавливающей способности двухуровневых ВГФН.

Сеточные насадки представляли собой ферромагнитную сетку из нержавеющей стали, изготовленную методом просечки стального листа с последующим растягиванием ее в направлении перпендикулярном просечкам [8]. Испытывали образцы сеточных ВГФН двух типов. Сетки первого типа (сетка №1) были изготовлены из листа толщиной 0,9 мм. Ячейка ромбовидной формы. Размер ячейки сетки №1 составлял 3*10 мм, размер перемычки – 2 мм. Масса сепарирующего элемента, изготовленного из сетки № 1, равнялась М1 = 3,95 г. Сетка второго типа представляла собой сетку №1, которую покрывали ферромагнитными частицами, создающими дополнительные области с высоким градиентом магнитного поля (дополнительные зоны улавливания). Для создания дополнительного улавливающего уровня на сетку наносили специальный клей (КО916) (который после высокотемпературного запекания не растворяется водой) и затем сетку покрывали слоем железных частиц с размерами 0,1 ÷ 0,3 мм и запекали. Масса сепарирующего элемента, изготовленного из сетки № 2, равнялась М2 = 4,85 г. Так как при покрытии сетки частицами и, соответственно, при уменьшении размеров ее ячейки возрастает гидродинамическое сопротивление сепарирующего элемента, то определяющим в экспериментах по определению улавливающей способности данных образцов являлось количество жидкости, прошедшей через магнитный сепаратор. Измерение улавливающей способности каждого из образцов проводили при пропускании через сепаратор объема модельной жидкости $V_{сл}$ = 300 мл. Намагничивающее поле (**H** = 150 Э) было приложено в направлении перпендикулярном плоскости сетки. Направление потока жидкости также было перпендикулярно плоскости сетки. Время, в течении которого через сепаратор проходил объем модельной жидкости $V_{сл}$ = 300 мл для сеток №1 и №2 составляло 68 секунд. Этот факт свидетельствует о том, что гидродинамические сопротивления испытуемых насадок были близки. Улавливающая способность каждой сетки, определялась как отношение массы захваченных ею частиц примеси к массе частиц примеси, содержавшихся в объеме модельной жидкости, прошедшей через сепаратор в данном опыте, то есть $\mathbf{m_ф / (m_{сл} + m_{см})}$. Для получения среднестатистических данных опыты при каждом наборе параметров эксперимента проводились не менее 5 раз.

В результате проведенных опытов установлено, что улавливающая способность сетки № 1 составила $\mathbf{m_ф / (m_{сл} + m_{см})}$ = 0,29±0,01, а для сетки № 2, содержащей второй уровень, $\mathbf{m_ф / (m_{сл} + m_{см})}$ = 0,32±0,01. То есть улавливающая способность сетки №2, за счет насадок второго уровня, хотя и незначительно (на 10%), но превосходит улавливающую способность сетки №1 даже в малых намагничивающих полях. Незначительность увеличения улавливающей способности сетки № 2 может быть обусловлена неоптимальным соотношением размеров первого и второго уровней и неоптимальным расстоянием между элементами второго уровня [7]. Для оптимизации работы сепарирующих элементов необходимы дополнительные исследования.

Для выяснения вопроса о зависимости величины вклада в улавливающую способность сеточных элементов со вторым уровнем насадок от размеров насадок второго уровня было проведено исследование влияния размеров насадок второго уровня на улавливающую способность двухуровневых ВГФН «ФМ шарики на ФМ пластине», которые можно рассматривать как модель элементов сетки (ФМ пластина) с нанесенными на них насадками второго уровня (ФМ шарики, расположенные в виде цепочки).

В данной серии опытов ВГФН представляли собой ФМ пластины с размерами 16*38*0,5 мм с закрепленными на них цепочками из трех ФМ шаров, диаметр которых изменяли в диапазоне от d = 2 мм до d= 7 мм. Расстояние между шарами – L=d. Величина напряженности намагничивающего поля составляла 150 Э. Средняя скорость потока модельной жидкости v = 2 см/сек. Поток жидкости набегал на ВГФН перпендикулярно плоскости ФМ пластины со стороны шариков. Измерение улавливающей способности каждого из образцов проводили при пропускании через сепаратор объема модельной жидкости $V_{сл}$ = 200 мл. На рисунке 2 представлена зависимость массы захваченных исследуемыми ВГФН ферромагнитных частиц от диаметра ФМ шаров второго уровня. Точка при d=0 соответствует улавливающей способности «чистой пластины», то есть улавливающей способности пластины без ферромагнитных шаров. Все точки на рисунке 2 нормированы на значение, соответствующее улавливающей способности пластины без ФМ шаров. Для сопоставления на рисунке 2 также приведена зависимость приращения ферромагнитной массы исследованных образцов, нормированная на ферромагнитную массу ФМ пластины, от размера насадок второго уровня (треугольники).

Из рисунка 2 видно, что с увеличением размера насадок второго уровня улавливающая способность ВГФН «ФМ шарики на ФМ пластине», в целом, возрастает пропорционально ферромагнитной массе насадки. В связи с этим отметим, что на сеточных образцах, при нанесении элементов второго уровня (сетка №2), приращение ферромагнитной массы по отношению к чистой сетке (сетка №1) составило 23 %, а приращение улавливающей способности не превысило 10 процентов.

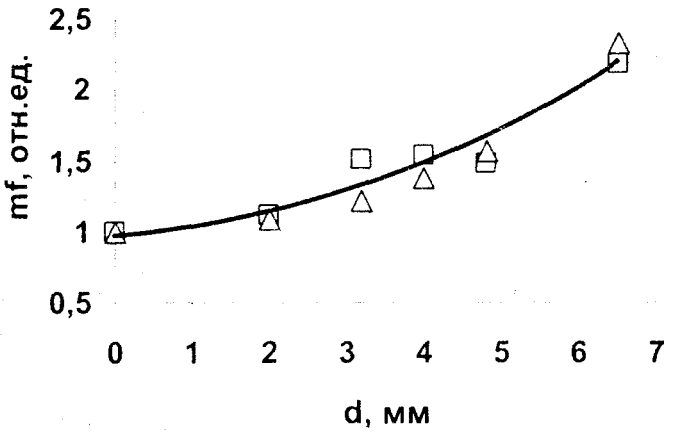


Рис. 2. Зависимость от размера насадок второго уровня **d** улавливающей способности двухуровневых ВГФН – кривая 1 (квадраты) и зависимость нормированного приращения ферромагнитной массы ВГФН – кривая 2 (треугольники)

Одним из возможных объяснений такого несоответствия является то, что ферромагнитные гранулы второго уровня, закрепленные на сетке №2, располагались близко друг к другу, в отличие от шариков на модельных пластинах, расположенных на расстояниях L=d. Такое тесное расположение ФМ гранул на сетке, по-видимому, не является оптимальным, так как в [7] было показано, что при уменьшении расстояния между шариками расположенными на ферромагнитной пластине улавливающая способность каждого шарика уменьшается.

При визуальном наблюдении за процессом осаждения ферромагнитных частиц в вертикальном магнитном поле на ВГФН, представляющую собой ФМ пластину с закрепленными на ней ФМ сферами замечено, что вокруг ФМ сферы образуется зона свободная от ферромагнитных частиц (рисунок 3). Размер этой зоны **Dz** (обозначение см. на рисунке 3) зависит от величины намагничивающего поля и размеров ФМ шарика.

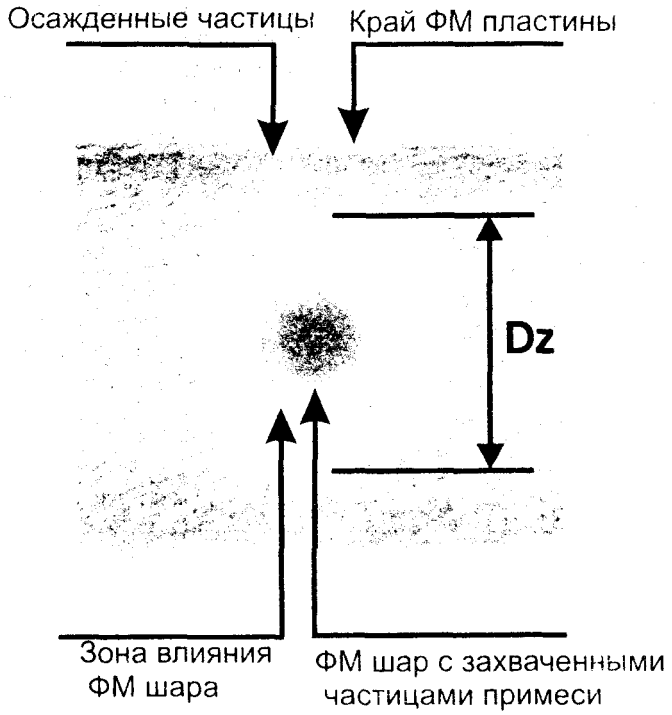


Рис. 3. Вид зоны влияния ФМ шара, закрепленного на ФМ пластине после осаждения частиц примеси на насадку в магнитном поле. Dz – размер зоны влияния ФМ шара, измеряемый в эксперименте

Следовательно, при некотором критическом соотношении размеров ФМ пластины и закрепленных на ней шариков, зависящем от величины намагничивающего поля, зона влияния ФМ шариков становится сопоставимой с шириной ФМ пластины, и будет мешать захвату частиц примеси краями ФМ пластины. Таким образом, можно считать, что зависимости размера **Dz (H)**, измеренные для определенных шариков, дадут зависимости критического размера пластин-основ для ВГФН, меньше которых зона влияния ФМ шарика

мешает улавливающей способности краев пластины. Для выяснения вида этих зависимостей были проведены измерения размеров зоны влияния ФМ шарика, закрепленного на ФМ пластине при осаждении ФМ частиц примеси в магнитном поле в условиях отсутствия сил гидродинамического сноса.

Эксперименты проходили следующим образом. В кювете закрепляли ФМ пластину с размерами 45*99*2 мм с закрепленным в ее центре ФМ шариком диаметром **D**. В кювету заливали модельную жидкость, содержащую частицы ФМ примеси и перемешивали. Затем включали магнитное поле напряженностью **H** и производили осаждение в магнитном поле в течение 5 минут. Магнитное поле было направлено параллельно силе тяжести и перпендикулярно плоскости ФМ пластины. После осаждения частиц примеси и формирования картинки аналогичной рисунку 3 измеряли размер зоны влияния ФМ шарика **Dz** при заданной величине **H**. Диапазон изменения **H** составлял от 0 Э до 600 Э. Диаметр шариков второго уровня **D** изменяли в диапазоне от 2 до 10 мм. Результаты измерения **Dz** представлены на рисунке 5 в виде зависимостей **Dz(H)** для шариков с разными диаметрами.

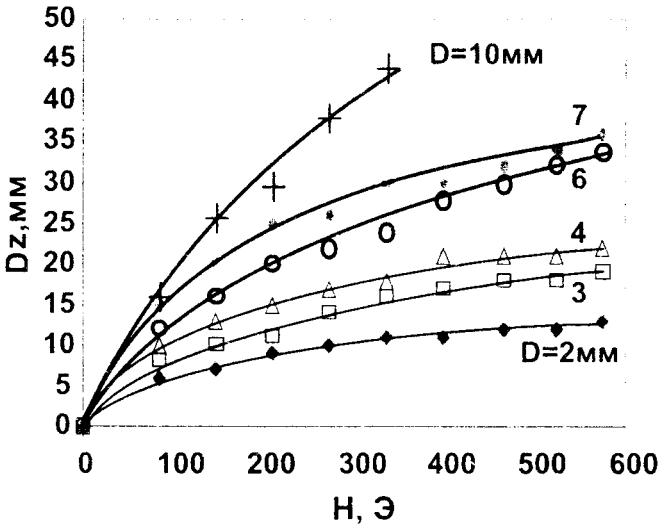


Рис. 4. Зависимости зоны влияния ФМ шариков диаметром D, закрепленных на ФМ пластине. Диаметры шариков в миллиметрах указаны около соответствующих кривых

Из рисунка 4 видно, что зона влияния шарика **Dz**, а, следовательно, и критический размер пластины, растет с ростом напряженности намагничивающего поля и увеличением диаметра шариков второго уровня. Так, например, для шариков диаметром 2 мм при намагничивающем поле H=400 Э размер зоны влияния шарика составляет величину ~ 10 мм, следовательно, ширина пластины, на которой могут быть закреплены такие шарики, должна быть не меньше 10 мм. Итак, кривые, представленные на рисунке 4, можно интерпретировать как полевые зависимости критического размера пластинчатой основы для каждого размера шарика.

Выводы

Таким образом, в настоящей работе методом измерения массы захваченных ферромагнитных частиц исследована улавливающая способность высокоградиентных ферромагнитных насадок в виде сеток и ферромагнитных насадок, моделирующих двухуровневые элементы сетки, в виде пластинчатых основ с цепочками ферромагнитных шаров разных диаметров. Показано, что ферромагнитные насадки, закрепленные на пластинчатых ферромагнитных элементах, повышают их улавливающую способность. Показано, что при оптимальном расположении насадок на пластинчатых элементах сепаратора улавливающая способность двухуровневых насадок растет пропорционально ферромагнитной массе элементов второго уровня, однако увеличение размеров элементов второго уровня должно быть ограничено требованиями к тонкости очистки, а также взаимодействием зоны влияния элементов второго уровня и краев пластинчатых элементов первого уровня. Исследованы зависимости размеров зоны влияния ферромагнитного шара, закрепленного на ферромагнитной пластине, при осаждении ферромагнитных примесей от величины намагничивающего поля и диаметра шара. Эти зависимости можно интерпретировать как полевые зависимости критического размера пластинчатой основы для каждого размера шара. Из рассмотрения материалов представленных в данной работе, следует, что увеличение улавливающей способности многоуровневых насадок требует оптимизации соотношения размеров элементов первого и второго уровней. Необходимо отметить, что расположение и размеры насадок второго уровня необходимо определять для

каждого конкретного сеточного сепаратора, исходя из требований для его пропускной способности, материалоемкости, гидродинамического сопротивления.

РЕЗЮМЕ

Методом вимірювання маси захоплених феромагнітних досліджено уловлюючу здатність сіткових високоградієнтних феромагнітних насадок з різними параметрами та високоградієнтних феромагнітних насадок, що моделюють дворівневі елементи сітки. Показано, що феромагнітні насадки, закріплені на феромагнітних елементах, підвищують їх уловлюючу здатність. Показано, що при оптимальному розташуванні насадок на пластинчастих елементах фільтру уловлююча здатність дворівневих насадок зростає пропорційно феромагнітній масі насадок. Досліджено залежності розміру зони впливу феромагнітної кулі, закріпленої на феромагнітній пластині, при осадженні феромагнітних домішок від величини намагнічуючого поля та діаметру кулі. Ці залежності можна інтерпретувати як польові залежності критичного розміру пластинчастої основи для кожного розміру кулі.

SUMMARY

Capturing ability of the grid-type multilevel high-gradient ferromagnetic attachments with different parameters and high-gradient ferromagnetic attachments simulating the two-level elements of a grid has been studied by method of measuring the mass of the captured ferromagnetic particles. It has been shown that the second level ferromagnetic attachments placed on the ferromagnetic elements increase their capturing ability. Also it has been shown that the capturing ability grows proportionally to the ferromagnetic mass of the attachments at their optimal placement on the plate elements of a filter. The dependences of the effect region of a ferromagnetic sphere placed on the ferromagnetic plate during depositing of the ferromagnetic impurities on the magnetizing field and sphere diameter have been studied. These dependences can be treated as ones of the plate base critical size on the magnetizing field.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Friedman G., Yellen B. Magnetic separation, manipulation and assembly of solid phase in fluids.// Current Opinion in Colloid & Interface Science. 10(3-4):158-166, 2005 Oct
2. Oberteuffer J.A. High Gradient Magnetic Separation: Basic Principles, Devices, and Applications // Industrial Application of Magnetic Separation, Liu, Y. A., Ed., New York, Institute of Electrical and Electronics Engineers.– 1979.
3. Сандуляк А.В. Магнитно-фильтрационная очистка жидкостей и газов. – М.: Химия, 1988. – 136 с
4. Горобец С.В., Горобец О.Ю. Оптимизация функциональных параметров высокоградиентных ферромагнитных насадок магнитных фильтров для очистки жидких сред// Химия и технология воды. – 2003. – Т.25, №6. – С.505-514.
5. Gorobets S.V., Gorobets O.Yu. Optimization of functional parameters of ferromagnetic bead of magnetic filter – lattice of ferromagnetic balls // Functional Materials. – 2002. – №1, Vol.9, P. 93-96.
6. Горобець С.В., Мельничук І.А., Бандурка Н.П., Михайлов В.І. Спосіб отримання насадки магнітного фільтра. Пат.№32641 України, кл. B01D 35/06, B 03C 1/30.–№99127050; Заяв.24.12.99; Опубл.15.02.2001 Бюл.№1.
7. Горобец Ю.И., Горобец С.В., Легенький Ю.А., Пименов Ю.Н. Влияние параметров многоуровневых высокоградиентных ферромагнитных насадок «шар-пластина» на эффективность улавливания парамагнитных микрочастиц // Вісник Донецького університету. Серія А: Природничі науки. – 2006. – №2. – С.189-194.
8. Горобець С.В., Горобець О.Ю., Піменов Ю.М., Мельничук І.О., Легенький Ю.А. Прискорення вилучення парамагнітних домішок із рідини магнітними фільтрами з дворівневими феромагнітними насадками// Вісник Донецького університету. СеріяА: Природничі науки. – 2005. – №1. – С.234-238.
9. Сандуляк А.В., Гаращенко В.И., Яцков Н.В., Дубчак В.А. Очистка аммиачной воды «ч.д.а.» магнитным осаждением железосодержащих примесей // Известия вузов: Серия «Химия и хим. технология». – 1985. – Т.28, №10. – С.80-83.
10. Сандуляк А.В. Магнитное осаждение частиц из жидкости в намагниченной насадке, состоящей из гранул произвольной формы // Химия и технология воды. – 1983. – Т.5, №5. – С.403405.
11. Сандуляк А.В., Яцков Н.В., Шепель Н.И. Влияние диаметра шаров намагниченной фильтрующей насадки на магнитное осаждение в ней примесей железа, содержащихся в жидком аммиаке // ЖФХ. – 1982. – Т.LVI, №5. – С.1271-1273.
12. Физические величины: Справочник / А.П.Бабичев, Н.А.Бабушкина, А.М.Братковский и др.; Под ред. И.С.Григорьева, Е.З.Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.

Надійшла до редакції 25.10.2007 р.

УДК 669:018; 669:788; 621

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ПРОЦЕССОВ В ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ ПРИ ИХ ГАЗОВОЙ ХИМИКО-ФИЗИЧЕСКОЙ (ТЕРМИЧЕСКОЙ) ОБРАБОТКЕ

Ю.М.Буравлев, А.Г.Милославский, А.Бархум,*
**Сирийский государственный университет*

Несмотря на то, что различные виды термической обработки (ТО) и химико-физической (термической) обработки (ХФО) с применением обычных (печных) методов и концентрированных потоков энергии (КПЭ) используются все более широко в промышленности, до настоящего времени проблема оптимизации состава газовой среды в этом аспекте является недостаточно решенной [1-10 и др.]. При выборе рабочих условий (состав газовой среды, температура процесса, его продолжительность и т.д.) для конкретных металлов и сплавов имеющийся банк данных является часто неполным. Поэтому происходящие при этом процессы требуют дальнейшего изучения. Целью настоящей работы являлось рассмотрение некоторых процессов, происходящих в реакционно-диффузионной зоне простых и сложнолегированных сталей при их обработке в атмосфере аргона в тлеющем и низковольтном искровом разрядах.

Объектом исследования служили конструкционные и высоколегированные стали (табл.). Состав этих сплавов был определен с весьма высокой точностью (они служат стандартными образцами при проведении эмиссионного атомного спектрального анализа соответствующих сплавов для контроля технологических процессов). Из таблицы следует, что концентрации марганца, кремния, углерода, серы и фосфора в этих компонентах находятся примерно в одном диапазоне (для каждого из элементов).

Таблица. Состав стандартных образцов

Тип стали	№№ с.о.	Содержание элементов, % по массе											
		Mn	Si	Ni	Cr	C	S	P	Mo	V	Cu	Co	W
Среднелегированная	405	1,28	1,38	0,12	0,21	0,058	0,06	0,017	0,017	0,32	0,015	–	–
	406	0,63	0,38	1,69	2,12	0,19	0,049	0,014	1,03	0,02	0,32	–	–
	407	0,13	0,69	0,61	3,00	0,50	0,012	0,033	0,82	0,28	0,43	–	–
	408	0,64	0,24	4,58	0,09	0,28	0,03	0,043	0,14	0,063	0,73	–	–
	409	0,48	1,07	3,14	1,22	0,11	0,015	0,025	0,77	0,28	0,23	–	–
	410	0,43	1,00	2,04	1,72	0,39	0,053	0,066	0,41	0,46	0,47	–	–
Хромистая	69	0,41	0,36	0,37	12,40	0,29	0,022	0,022	–	–	–	–	–
	70	0,38	0,35	0,40	16,35	0,18	0,024	0,024	–	–	–	–	–
	71	0,43	0,31	0,56	24,00	0,10	0,024	0,016	–	–	–	–	–
	72	0,91	0,92	2,16	16,15	0,18	0,026	0,030	–	–	–	–	–
Быстрорежущая	481	0,29	0,14	–	3,56	0,69	0,027	0,021	0,22	0,52	–	0,21	14,2
	482	0,28	0,13	–	4,09	0,70	0,025	0,021	0,27	0,98	–	0,24	18,1
	483	0,29	0,11	–	3,21	0,67	0,025	0,019	0,17	0,54	–	1,94	10,8
	484	0,21	0,20	–	5,17	0,85	0,024	0,030	0,07	0,94	–	10,4	22,4
	485	0,12	0,14	–	4,53	0,74	0,029	0,021	0,23	1,91	–	1,91	6,48

В основу методики исследования было положено следующее соображение. Как известно, при проведении атомного эмиссионного анализа металлов и сплавов интенсивность спектральных линий определяемого элемента с его концентрацией связана соотношением Ломакина-Шайбе и в подавляющем большинстве случаев имеет прямолинейную зависимость в достаточно широком интервале концентраций этого элемента. Если же появляется действие какого-либо фактора, меняющего поступление атомов элемента в излучающее облако (сильное изменение состава или структуры сплавов, температуры электродов и т.п.), то эти зависимости в форме градуировочных кривых в координатах интенсивность-концентрация испытывают параллельное смещение или изменение угла наклона [11]. Таким образом, совместная регистрация спектров этих элементов давала возможность оценить особенности влияния повышенных концентраций хрома (12-24%) во второй группе сплавов, а также повышенных концентраций хрома (3-5%) и вольфрама (6-22%) на изменение концентрационных зависимостей интенсивности спектральных линий этих элементов, т.е. в конечном счете на распыление этих элементов под воздействием тлеющего разряда в очищенном аргоне. Как известно, ранние исследования показали, что при использовании тлеющего разряда, также как и при традиционных искровых и дуговых разрядов во многих сплавах (стали, чугуны, бронзы, алюминий) наблюдаются прямолинейные концентрационные зависимости.

Исследование проводилось с использованием квантометра АРЛ-31000. Параметры разряда: $U = 1300$ В, $I = 0{,}12$ А, время предварительного облучения – 30 сек, время интегрирования – 5 сек. В ка-

© Буравлев Ю.М., Милославский А.Г., Бархум А.

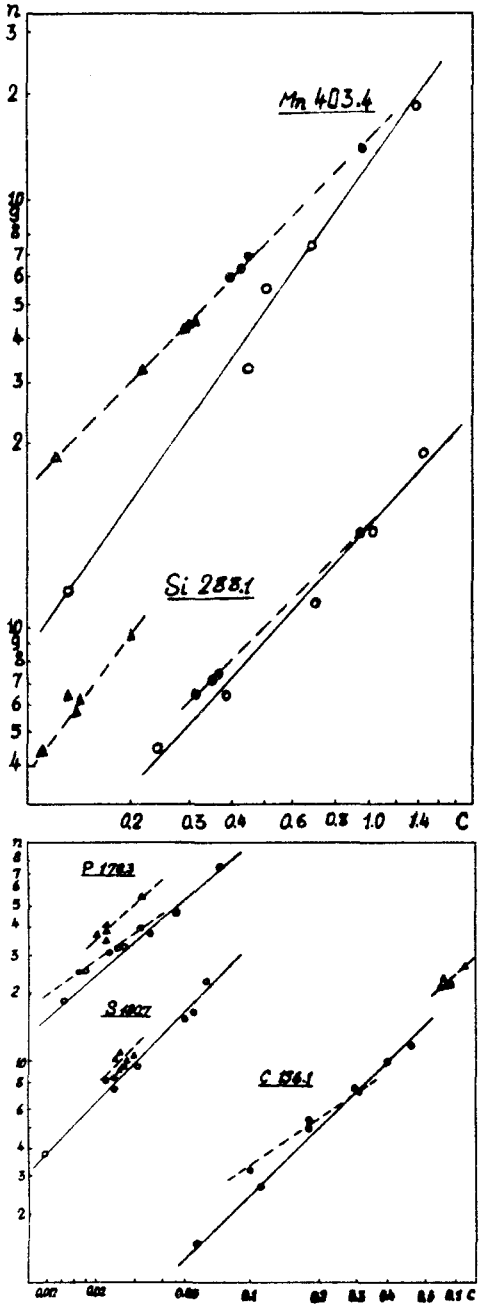


Рис. 1. Концентрационные зависимости интенсивности спектральных линий марганца и кремния, фосфора, серы и углерода при регистрации в тлеющем разряде спектров среднелегированных (о), выскохромистых (•), и быстрорежущих (Δ) сталей

честве источника низковольтной искры применялся генератор вакуумного спектрометра Р-8350 фирмы «Филипс» при следующих параметрах: $U = 500$ В, $C = 15$ мкФ, $L = 150$ мкГн, $h = 300$ Гц. Обработка образцов производилась в атмосфере очищенного аргона, содержание кислорода в котором составляло < 0,005%. При повышении его концентраций наблюдались нарушения в протекании разрядов. Следует отметить высокую точность регистрации спектральных линий (0,8-1% отн.).

Полученные градуировочные зависимости: интенсивность – концентрация, полученные при фотоэлектрической регистрации спектров, представлены на рис. 1, 2. Оценка этих кривых позволяет отметить следующее.

Прежде всего, обращает на себя внимание, что в большинстве случаев сохраняется прямолинейная зависимость интенсивности линий от концентрации элементов в довольно широких пределах, например, при определении марганца (0,12-1,3%), кремния (0,11-1,4%), углерода (0,05-0,85%), серы (0,005-0,05%), фосфора (0,014-0,066).

Концентрационная чувствительность (dn/dc) также удовлетворительна для всех определяемых элементов, о чем свидетельствует достаточные наклоны градуировочных кривых. К сожалению, относительно неширокий диапазон концентрации, например, по сере и углероду в стандартных образцах быстрорежущих сталей не позволил уверенно установить наклон соответствующих градуировочных кривых.

Сопоставление градуировочных кривых для элементов, принадлежащих к различных классам сталей, указывает на существенное влияние композиции сплавов на их наклон и смещение. Так, при определении кремния, углерода, фосфора и серы имеет место существенное расхождение в расположении кривых, достигающее в пересчете на концентрации 10-30% отн. и более*. Поскольку, как указывалось выше, интенсивность спектральных линий элементов пропорциональна их содержанию в излучающем облаке, то полученные концентрационные зависимости отражают процессы распыления (испарения) этих элементов.

Это дает основание полагать, что изменение коэффициентов распыления марганца, кремния и др. элементов под влиянием вариации состава сплавов коррелируют с указанными величинами для каждого элемента и могут быть выражены соответствующими коэффициентами.

Оценивая систематические расхождения между соответствующими концентрационными зависимостями, до сих пор подразумевалось, что они вызваны, в основном влиянием композиции сплавов. Однако, различия в составе сплавов приводят к резкому изменению их структуры. По существу все исследованные группы сплавов принадлежат к трем различным структурным классам сталей. Так, например, быстрорежущие стали в отожженном состоянии имеют до 30% сложных карбидов. Естественно, такое различие в их структуре приводит к изменению процессов электрической эрозии и, соответственно, процессов поступления различных атомов в излучающее облако. Поэтому расхождения в расположении градуировочных кривых для различных групп сталей обусловлены суммарным действием двух факторов: вариацией состава, с одной стороны, и изменением структуры, с другой. Для определения вклада каждого из них в общий результат нужны соответствующие исследования.

* При оценке расхождений градуировочные кривые, построенные с помощью стандартных образцов среднелегированных сталей, считались за основные

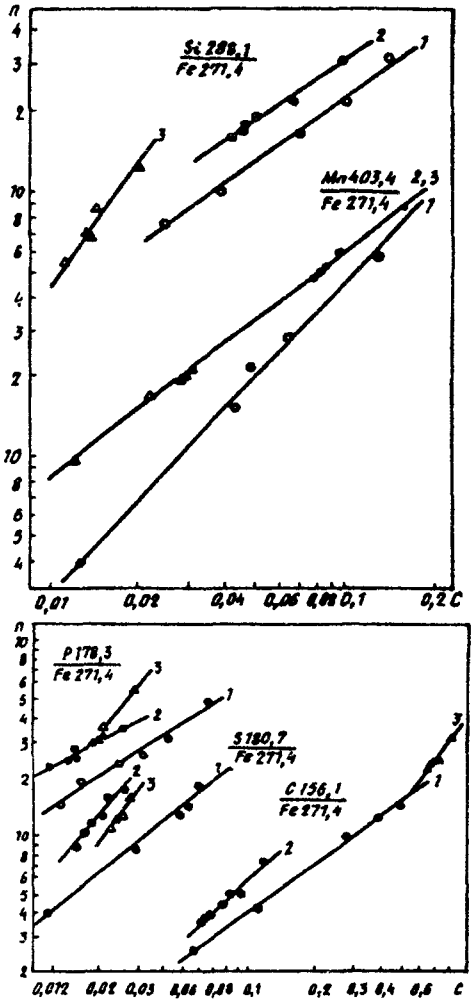


Рис. 2. Концентрационные зависимости спектральных линий кремния, марганца, фосфора, серы и углерода, полученные при использовании низковольтной искры: 1 – углеродистые; 2 – хромистые; 3 – быстрорежущие стали

ся по [40]). Однако, следует указать их недостатки: необходимость более полного рассмотрения протекающих процессов на атомарном уровне; явления следует рассматривать с учетом дефектности кристаллического строения металлов и сплавов; необходим учет реакций, протекающих с участием других газов, присутствующих в реакционном объеме.

Таким образом, при рассмотрении перспективы дальнейших исследований в указанных направлениях желательно руководствоваться учетом следующих соображений, высказанных ранее [4, 41-43]:

1. Противоречивость литературы по проблеме влияния состава рабочих газовых сред на процессы химико-физической обработки металлов и сплавов вследствие недостаточной изученности явления;

Дополнительные эксперименты позволили оценить временные зависимости распыления отдельных элементов, а также изменение рельефа поверхности под воздействием ионной бомбардировки (рис. 3). Ход кинетических зависимостей интенсивности спектральных линий для разных групп сплавов дает основание заключить, что распыление отдельных элементов зависит от характера элемента и композиции сплавов, а также параметров и длительности воздействия тлеющего и низковольтного разряда. Существенную роль в этих процессах играет взаимодействие металлов с кислородом иногда присутствующего в газах даже в очень малых количествах (рис. 4).

Оценивая общие перспективы в этом направлении, следует отметить необходимость усиления теоретических и прикладных исследований поверхностных процессов, проходящих при химико-физических методах обработки металлов и сплавов с применением как разнообразных традиционных (печных) методов, так и КПЭ. Так, на рис. 4 в качестве примера приведена одна из схем таких процессов. В этой связи весьма ценными является цикл работ, проведенных в предыдущие годы [14-40] (Цитируется по [40]).

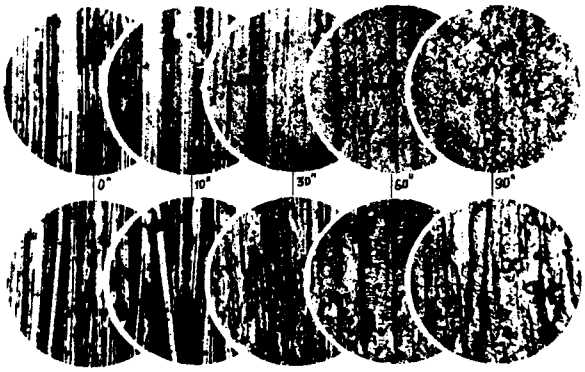


Рис. 3. Формирование рельефа зоны облучения во времени в тлеющем разряде образцов среднелегированной и нержавеющей (внизу) сталей

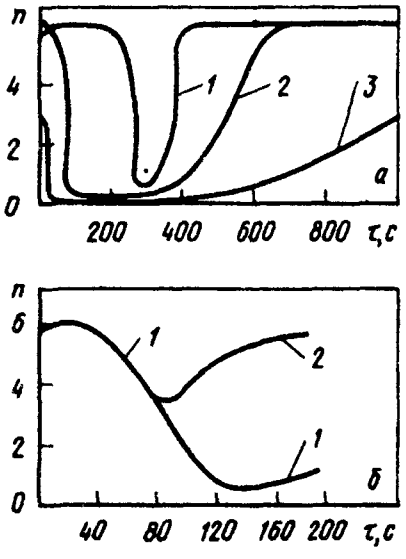


Рис. 4. Изменение интенсивности линий железа при обыскривании стальной пробы в Ar разной чистоты: *а* – чистом (*1*); со следами O_2 (*2*); очень грязном (*3*); *б* – в момент τ=80 с в Ar со следами O_2 подан H_2 [12]

2. Необходимость учета совместного воздействия кислорода и водорода на процессы химико-физической обработки, а также их взаимодействия между собой и с другими газами на основе термодинамических и кинетических закономерностей;

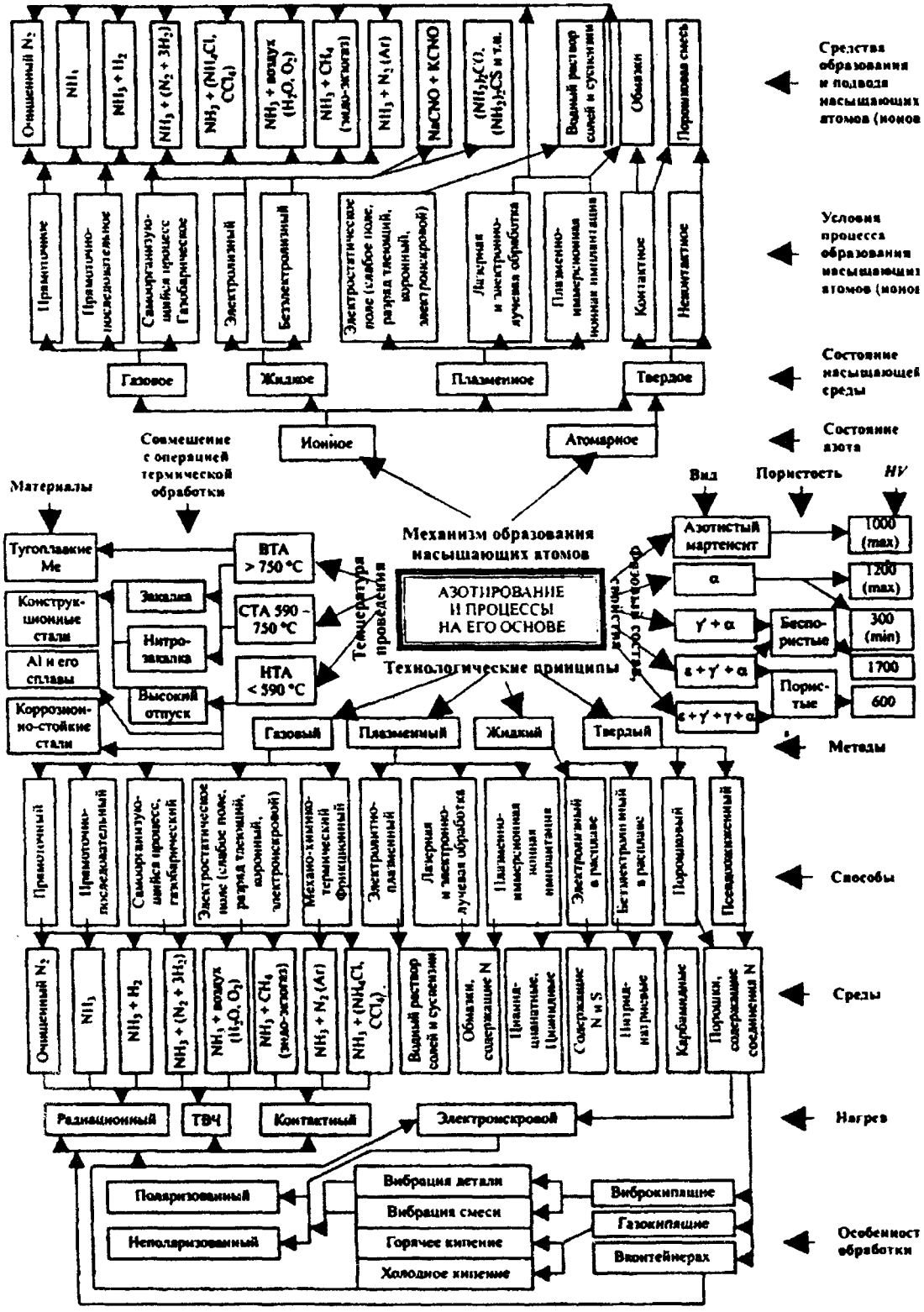


Рис. 5. Одна из схем процесса азотирования [13]

3. Необходимо учитывать, что на формирование физико-химических свойств поверхностных слоев металла в реакционно-диффузионной зоне оказывает существенное влияние не только изменения их состава и структуры, но и соответствующие преобразования дефектной структуры и механические на-

пряжения. По существу речь идет о необходимости привлечения некоторых положений нового направления в металлофизике – инженерии поверхности металлов [44-47 и др.];

4. Дальнейшее планирование экспериментов необходимо проводить совместно с применением как традиционных (печных) методов ХФО, так и КПЭ (искровые разряды, лазерное излучение, ионные пучки и др.). Это предполагает более полное привлечение имеющейся информации о физико-химических процессах (диффузия, эрозия, окисление и др.) к оценке протекающих явлений;

5. При использовании концентрированных потоков энергии для ХФО металлов и сплавов необходимо учитывать влияние состава газовой среды на изменение условий возбуждения и ионизации и в рабочей среде;

6. При разработке адекватной физической модели указанных процессов необходимы конкретные исследования влияния кислорода, водорода, азота, углерода и общего состава газовой смеси, на различные виды ХФО, с одной стороны, а также типа основы и композиции обрабатываемых сплавов, с другой.

РЕЗЮМЕ

У роботі розглянуто особливості формування реакційно-дифузійної зони при газовій хіміко-фізичній обробці металів і сплавів. Висловлено деякі зауваження з приводу процесів в зоні. Намічено деякі перспективи подальших досліджень в цьому напрямку.

SUMMARY

In work features of formation reactionary-diffusion zones are considered at gas chemical and physical treatment metals and alloys. Some reasons concerning development of processes in zone. The perspective of investigation in future are outlined.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Минкевич А.Н. Химико-термическая обработка металлов и сплавов. – М.: Металлургия, 1965. – 491с.
2. Арзамасов Б.Н. Химико-термическая обработка металлов в активизированных средах. – М.: Машиностроение, 1979. – 240 с.
3. Лахтин Ю.М., Булгач А.А. Теория химико-термической обработки стали. – М.: Машиностроение, 1982. – 54 с.
4. Барьяхтар В.Г, Буравлев Ю.М., Милославский А.Г. и др. Водород в диффузионных процессах химико-термической обработки металлов и сплавов. – Киев: Наукова думка, 1999. – 256 с.
5. Лахтин Ю.М., Коган Я.Д., Шпис Г.И. и др. Теория и технология азотирования. – М: Металлургия, 1991. –319 с.
6. Лахтин Ю.М., Коган Я.Д., Кольцов В.Е. и др. Влияние предварительного оксидирования на процесс кратковременного азотирования. – МиТОМ, 1993, 3. – С. 31-33.
7. Солдатков В.И., Межонов А.Е., Александров В.А., Бибиков С.И. Разработка технологии и комплекса оборудования сталей в атмосфере аммиака и воздуха // МиТОМ, 1988. – № 12. – С. 28-30.
8. Буравлев Ю.М., Бархум А. Некоторые особенности воздействия интенсивных ионных пучков на металлы и сплавы. Конф. «Взаимодействие атомных частиц с твердым телом. – Минск: Изд-во М-В. ССО СССР и АН СССР, 1984. – С. 143-144.
9. Бархум А. Исследование особенностей воздействия интенсивных ионных пучков на структуру и свойства металлов и сплавов. Дисс… канд. физ.-мат. наук. – Донецк, ДонНУ, 1987. – 175 с.
10. Буравлев Ю.М., Бархум А., Милославский А.Г. О влиянии ионных пучков азота и водорода на формирование реакционно-диффузионной зоны сталей и титана при их химико-физической обработке. Вісник Донецького університету. Серія А, 2007. – С. 187-191.
11. Буравлев Ю.М. Атомно-эмиссионная спектрометрия металлов и сплавов. – Донецк, ДонГУ, 2000. – 437 с.
12. Slickers K., Scholze H. Arch Eisenhutt, 1972, 1. – S. 49-55.
13. Пастух И.М. Азотирование в тлеющем разряде: теория и практика. ОТТОМ-4, 2003. – С. 241-257.
14. Badescu, Salo, Ala-Nissila, Ying, Jacobi,Wang, Bedьrftig and Ertl, Energetics and vibrational states of hydrogen on Pt(111) Physical Review Letters 88, 136101 (2002).
15. Badescu, Jacobi, Wang, Bedьrftig, Ertl, Salo, Ala-Nissila and Ying, Vibrational states of a H monolayer on the Pt(111) surface Physical Review B 68 205401 (2003).
16. Bassignana, Wagemann, Kuppers and Ertl, Adsoption and thermal decomposition of ammonia on a Ni(110) surface – isolation and identification of adsorbed NH2 and NH Surface Science 114 22 (1986).
17. Behm, Thiel, Norton and Ertl, The interaction of CO and Pt(100).1.Mechanism of adsorption and Pt phase transition Journal of Chemical Physics 78 7437 (1983).
18. Beta, Moula, Mikhailov, Rotermund and Ertl, Excitable CO oxidation on Pt(110) under nonuniform coupling Physical Review Letters 93 188302 (2004).
19. Bozso, Ertl, Grunze and Weiss, Chemisorption of hydrogen on iron surfaces Applied Surface Science 1, 103 (1977a).
20. Bozso, Ertl, Grunze Interaction of nitrogen with iron surfaces.1. Fe(100) and Fe(111) Journal of Catalysis 49, 18 (1977b).
21. Christmann, Schober, Ertl and Neumann, Adsorption of hydrogen on nickel singlecrystal surfaces Journal of Chemical Physics 60 4528 (1974).

22. Christmann, Ertl and Pignet, Adsorption of hydrogen on a Pt(111) surface Surface Science 54 365 (1976).
23. Christmann, Behm, Ertl, VanHove and Weinberg, Chemisorption geometry of hydrogen on Ni(111) – order and disorder Journal of Chemical Physics 70 4168 (1979).
24. Conrad, Ertl and Latta, Adsorption of hydrogen on palladium single-crystal surfaces Surface Science 41 435 (1974).
25. Cox, Ertl and Imbihl, Spatial self-organization of surface-structure during an oscillating catalytic reaction Physical Review Letters 54 1725 (1985).
26. Drechsler, Hoinkes, Kaarmann and Ertl, Interaction of NH3 with Fe(110) – Identification of surfaces species by means of secondary ion mass-spectroscopy (SIMS) Applied Surface Science 3 217 (1979).
27. Eiswirth, Moller, Wetzl, Imbihl and Ertl, Mechanisms of spatial self-organization in isothermal kinetic oscillations during the catalytic CO oxidation on Pt single-crystal surfaces Journal of Chemical Physics 90 510 (1989).
28. Ertl, Weiss and Lee, Role of potassium in the catalytic synthesis of ammonia Chemical Physics Letters 60 391 (1979).
29. Ertl and Thiele, XPS studies with ammonia-synthesis catalysts Applied Surface Science 3 99 (1979).
30. Ertl, Huber, Paöl and Weiss, Interactions of nitrogen and hydrogen on iron surfaces Applied Surface Science 8 373 (1981).
31. Ertl, Lee and Weiss, Kinetics of nitrogen adsorption on Fe(111) Surface Science 114 515 (1982).
32. Ertl, Primary steps in catalytic synthesis of ammonia Journal of Vacuum Science and Technology A1 1247 (1983).
33. Imbihl, Behm, Ertl and Moritz, The structure of atomic nitrogen adsorbed on Fe(100) Surface Science 123 129 (1982).
34. Imbihl, Cox and Ertl, Kinetic oscillations in the catalytic CO oxidation on Pt(100) – Theory Journal of Chemical Physics 83 1578 (1985).
35. Imbihl, Cox and Ertl, Kinetic oscillations in the catalytic CO oxidation on Pt(100) – Experiments Journal of Chemical Physics 84 3519 (1986).
36. Jakubith, Rotermund, Engel, von Oertzen, Ertl, Spatiotemporal concentration patterns in a surface reaction – Propagation and standing waves, rotating spirals and turbulence Physical Review Letters 65 3013 (1990).
37. Kim, Bertram, Pollmann, von Oertzen, Mikhailov, Rotermund and Ertl, Controlling turbulence by global delayed feedback: Pattern formation in catalytic CO oxidation on Pt(110) Science 292 1357 (2001).
38. Weiss, Ertl and Nitschke, Adsorption and decomposition of ammonia on Fe(110) Applied Surface Science 2 614 (1979).
39. Ertl G. From artificial fertilizers to clean exhaust. The Nobel Prize in Chemistry 2007. The Royal Schwlish Academy of Sciences.www.kwa.se – P. 1(6)-6f.
40. Wennerstrom H., Lidin S. Chemical Processes on Solid Surfaces. Scientific Background on the Nobel Prize in Chemistry 2007. 10 October 2007 – P. 1-10.
41. Барьяхтар В.Г., Буравлев Ю.М., Шевченко В.П. и др. О влиянии кислорода на процессы химико-термической обработки металлов и сплавов. – Донецк: Препринт ДонГУ № 2, 2000. – 86 с.
42. Барьяхтар В.Г., Буравлев Ю.М., Шевченко В.П. и др. Особенности поведения кислорода в процессах химико-термической обработки металлов и сплавов. – Донецк: Препринт ДонГУ № 4, 2000. – 94 с.
43. Барьяхтар В.Г., Буравлев Ю.М., Шевченко В.П. и др. Особенности оптимизации состава газовой среды при химико-термической обработке металлов и сплавов. – Донецк: Препринт ДонГУ № 5, 2003. – 117 с.
44. Burakowski T., Wierzchon T. Surface Engineering of Metals. Principles Equipment, Technologies. – Published by: CRC Press. Roca Raton – London – New York – Washington, D.C., 1999. – P.594.
45. Зинченко В.М. Инженерия поверхности – путь достижения предельных свойств деталей. МИТОМ, 1999, №7. – С.22-31.
46. Ягодкин Ю.Д., Пастухов К.М., Мубояджян С.А. и др. Перспективы применения потоков заряженных частиц в инженерии поверхности. МИТОМ, 1999, №7. – С.31-36.
47. Зинченко В.М., Сыропятов В.Я., Прусаков Б.А. и др. Азотный потенциал: современное состояние проблемы и концепция развития. – М.: Машиностроение, 2003. – 71 с.

Надійшла до редакції 14.11.2007 р.

УДК 620.179(035)

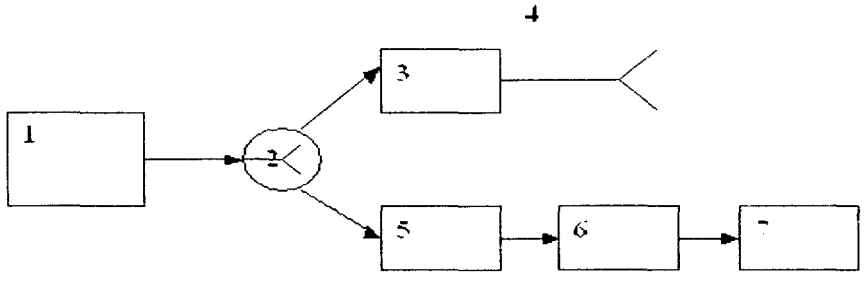
МЕТОД ИЗМЕРЕНИЯ МАЛЫХ РАССТОЯНИЙ С ВЫСОКОЙ ТОЧНОСТЬЮ

В.А.Богатырёв, С.П.Сергиенко, Н.Ф.Шпаренко

Несмотря на довольно развитые методы измерения расстояний [1], методология автоматизированных измерений малых расстояний продолжает совершенствоваться. Одним из направлений такого развития является использование принципов и методов физики сверхвысоких частот (СВЧ) [2].

Способы измерения расстояний известны, например, с помощью генератора с линейным изменением частоты (ГЛИЧ) [3]. Принцип действия измерителя основан на определения разности частот сигнала ГЛИЧ излучаемого в данный момент времени и частотой сигнала пришедшего после отражения от препятствия. Предполагается, что частота сигнала ГЛИЧ изменяется по линейному закону: $f(t) = f_0 + a*t$, где: a – скорость изменения частоты, f_0 – минимальная частота, с которой начинается линейный рост частоты. Данный способ предполагает высокую линейность изменения частоты, в соответствии с выражением: $\gamma = \frac{\alpha_{\max} - \alpha_{\min}}{f_{\max}}$, где: γ – коэффициент нелинейности изменения (качания) частоты, $a_{\min}$, $a_{\max}$ – минимальная и максимальная скорость изменения частоты, $f_{\max}$ – девиация частоты. Максимально возможная относительная погрешность определения времени задержки сигнала связана с коэффициентом нелинейности выражением $\delta = \gamma F_{\max}$, где $F_{\max}$ – максимальная частота. За период девиации будет посчитано $N = \frac{\Delta f}{\Delta F}$ периодов разностной частоты с погрешностью счетного метода ± 1. Относительная погрешность определения расстояния составит: $\frac{\Delta l}{l} = \frac{\Delta F}{\Delta f}$. Тогда минимальное расстояние, которое можно измерить с заданной точностью определяется в соответствии с выражением: $l_{\min} = \frac{c\Delta F}{a\frac{\Delta l}{l}}$. Для допустимых значений выше указанных параметров $a = 5 \cdot 10^{12}$, $\Delta F = 5 \cdot 10^{8}$, минимальное расстояние, измеряемое с точностью $\Delta = 10^{-3}$ составляет $3 \cdot 10^{3}$ м. Откуда видно не приемлемость существующей структуры ГЛИЧ для измерения малых расстояний.

В данной работе проведен анализ автоматизированного метода определения малых расстояний с помощью усовершенствованного ГЛИЧ, структура аппаратных средств которого представлена на рисунке.



Прибор содержит генератор частотно модулированных колебаний 1, циркулятор 2, фазовый модулятор 3, антенну 4, смеситель 5, усилитель-ограничитель 6, счетчик импульсов 7. Принцип работы прибора заключается в следующем: сигнал генератора частотно модулированных колебаний поступает в одно из плеч циркулятора и на выходе его (из другого плеча циркулятора) через фазовый модулятор поступает в излучающую антенну. Отразившись от поверхности (препятствия), расстояние до которой необходимо определить, сигнал поступает в эту же антенну после повторного прохождения фазового модулятора поступает в соответствующее плечо циркулятора и и далее в смеситель. На второй вход сме-

© Богатырёв В.А., Сергиенко С.П., Шпаренко Н.Ф.

сителя, вследствие не идеальности характеристики циркулятора, так же поступает сигнал с генератора частотно модулированных колебаний. На выходе смесителя сигнал поступает на усилитель-ограничитель и далее, на счетчик. Частота фазовой модуляции генератора 1 выбирается меньше на 2-3 порядка, чем частота свипирования, а амплитуда с учетом двойного прохождения сигнала через модулятор должна быть $\geq\pi$.

При такой структуре измеритель будет считать число импульсов, которое пропорционально периоду свипирования ГКЧ, разделенному на период разностного сигнала.

Частота ГКЧ и частота фазового модулятора должны быть не коррелированны между собой [4]. Фазовый сдвиг между излучаемым и отраженным сигналами за полный период свипирования может не превышать 2 π, что будет иметь место в случае расположения прибора на минимальном расстоянии от измеряемого объекта. Это соответствует одному импульсу поступающему на счетчик, однако с учетом дополнительного фазового сдвига обеспечиваемого фазовым модулятором это приводит изменению числа импульсов на ±1. После усреднения за период времени кратный, но значительно превышающий период фазовой модуляции, счетчик покажет число импульсов пропорциональное времени задержки сигнала выраженное в долях периода разностного сигнала.

Следует отметить, что предложенный метод измерения расстояния не критичен к линейности свипирования частоты, так как фактически измеряется полный фазовый сдвиг за период свипирования, не зависящий от скорости изменения частоты, т.е. $\Delta\varphi = \int_{F_{min}}^{F_{max}} \frac{df(t)}{dt} dt = \Delta F * \tau$, где: τ - время задержки отраженного сигнала, $\Delta F = F_{max} - F_{min}$.

Следовательно, полный фазовый сдвиг зависит от диапазона свипирования частоты, определяется разностью между максимальной и минимальной частотами, и ни как не зависит от скорости изменения частоты и функциональной связи частоты от времени. Для приемлемого диапазона изменения частоты $\Delta F = 5 \cdot 10^8$ Гц, минимальное расстояние которое можно измерить составляет $l_{\min} = \frac{\pi c}{\Delta F}$.

Проведем оценку времени измерения расстояния в зависимости от погрешности. Минимальное расстояние до объекта обозначим $l_{\min}$, погрешность измерения δ. За один период свипирования, если предположить, что при этом полный фазовый сдвиг не превышает π, погрешность измерения составляет $\delta = \frac{l_{\min}}{2}$. В случае n – кратных измерений полная погрешность измерения составляет $\frac{\delta}{\sqrt{n}}$ [5]. Время измерения минимального расстояния в течении n периодов свипирования определяется выражением: $t = T_{svip} \cdot n$.

Таким образом, для измерения минимального расстояния в 1м с точностью до 1 мм, необходим диапазон свипирования 450 МГц в районе центральной частоты 10 ГГц, при периоде свипирования Т=100 мксек. При этом время измерения для обеспечения погрешности в 1 мм составляет 100 сек, что вполне приемлемо для прецизионных измерений в прикладной физике (радиофизике).

Выводы.

Проведен анализ возможности использования известного способа измерения расстояний на основе ГЛИЧ, для измерения малых расстояний с высокой точностью.

Предложено совершенствование структуры ГЛИЧ, без ограничений на линейность изменения частоты.

Показано, что минимальное расстояние и диапазон девиации частоты ГЛИЧ, являются взаимно коррелированными параметрами, которые должны находится в определенном диапазоне значений. Точность измерения малых расстояний и время измерения также находятся в приемлемых рамках при проведении прецизионных измерений в физическом эксперименте.

РЕЗЮМЕ

Розглянуто автоматизований метод виміру малі відстані за допомогою частотно модульованої СВЧ хвилі. Наведено структуру апаратних засобів методу. Показано, яким шляхом при вимірі фазового зрушення між відбитою й випромінюваною хвилею можна поліпшити точність вимірів. Отримано оцінки параметрів можливої приладової реалізації.

SUMMARY

The automated method of measurement small distances is considered by means of is frequency the modulated MICROWAVE of a wave. The structure of hardware of a method is resulted It is shown, to what by at measurement of phase shift between the reflected and radiated wave can improve accuracy of measurements. Estimations of parameters of possible instrument realization are received.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Измерения в промышленности. Справ. изд. В 3-х кн. Кн. 1. Теоретические основы. Пер. с нем. / Под ред. Профоса П. – 2-ое изд., перераб. и доп. – Москва: Металлургия, 1990.
2. Акустические методы контроля. Практ. пособие. В 5-ти кн. Кн.2. / И.Н.Ермолаев, И.П.Алешин, В.И.Потапов. Под ред. В.А. Сухорукова. – Москва: Высшая школа, 1991.
3. Ермолаев Г.И., Гамулин А.Г., Прагер И.Л., Сафронов Е.В. Основы радиолокации и радиолокационное оборудование летательных аппаратов. – Москва: Машиностроение, 1967.
4. Бова М.Т., Гойжевский В.О., Маевский Е. М., Молебный В. В. Измерение разности фаз в радиоэлектронике: – Киев: Выща школа, 1972.
5. Дворяшин Б.В., Кузнецов Л.И. Радиотехнические измерения. – Москва, Советское радио, 1978.

Надійшла до редакції 20.11.2007 р.

Х І М І Я

УДК 513.71:541.64

РЕАКЦИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МАЛЕИНОВОГО АНГИДРИДА С N-ВИНИЛПИРРОЛИДОНОМ

А.В.Фарафонова, Т.Г.Тюрина, Р.А.Макарова, В.В.Зайцева,
Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.Н. Литвиненко НАН Украины

Известно [1, 2], что МА является мономером с ярко выраженными электроноакцепторными свойствами, который легко вступает в донорно-акцепторные взаимодействия с π-донорными соединениями различной природы, к которым относятся и N-виниловые мономеры (π-р-π доноры) [2, 3]. Наиболее активным донором из изученных N-виниламидов является N-винилпирролидон. Авторы [3] предполагают, что реакция сополимеризации малеинового ангидрида (МА) с N-виниловыми мономерами, и в частности, с N-винилпирролидоном (ВП), может быть рассмотрена как реакция гомополимеризации донорно-акцепторного комплекса, протекающая в результате его последовательного присоединения к растущему радикалу. Однако до настоящего времени не ясна структура этого комплекса. В работе [4] сделана попытка представить возможное расположение молекул МА и ВП в пространстве при их взаимодействии, однако описанная структура образована за счет полярных взаимодействий и не вполне согласуется с представлениями о последовательном присоединении комплекса к растущему макрорадикалу.

Поэтому целью представленной работы является получение расчетных и экспериментальных данных о строении комплекса малеинового ангидрида с N-винилпирролидоном и его влиянии на процесс сополимеризации.

ВП фирмы «Merck» сушили над гидроксидом калия и перегоняли под вакуумом, отбирая фракцию 91±0,05°С / 6 мм. рт. ст. ($n_D^{20} = 1{,}5115$, по данным [5] $n_D^{20} = 1{,}5117$). МА дважды возгоняли перед использованием ($t_{пл}$ = 53°С). Инициаторы и растворители после очистки общепринятыми методами по своим характеристикам соответствовали данным литературы.

Для определения константы равновесия K_p методом УФ и ^{1}Н ЯМР готовили смеси МА и ВП в растворе CCl_4 с постоянной концентрацией МА 0,05 моль/л и концентрацией ВП, изменяющейся в пределах 0,75÷2,5 (УФ) и 1÷4,3 моль/л (^{1}Н ЯМР). Спектры записывали на приборе Specord UV-VIS в области 330–400 нм (в кварцевых кюветах с толщиной слоя 10 мм) в случае УФ спектроскопии и Gemini-200 (200 МГц, внутренний стандарт – тетраметилсилан, погрешность измерения химических сдвигов ±0,0025 м.д) для ^{1}Н ЯМР спектроскопии Расчет K_p по данным электронных спектров проводили согласно уравнению Бенеши-Гильдебранда [1]:

$$\frac{1}{D}[MA]_0 = \frac{1}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon K_p}\frac{1}{[ВП]} \qquad (1)$$

где D – оптическая плотность; $[MA]_0$ – исходная концентрация МА, моль/л; ε – коэффициент экстинкции; $[ВП]$ – концентрация ВП, моль/л.

Для определения K_p методом ^{1}Н ЯМР использовали уравнение [6]:

$$\frac{1}{[ВП]} = \Delta_{комп} K_p \frac{1}{\Delta} - K_p \qquad (2)$$

где $\Delta_{комп}$ – разность химических сдвигов протонов акцептора в комплексе и в растворителе, м.д.; $\Delta=(\delta_{набл}-\delta_0)$ – наблюдаемое изменение химического сдвига сигнала протонов акцептора в присутствии донора и в растворителе, м.д.

ИК спектры записывали на спектрометре Specord IR-75 в области 1900–1500 см$^{-1}$ для смеси [ВП]:[МА] = 1:1 и индивидуальных компонентов в виде растворов в хлороформе с концентрацией ~ 0,045 моль/л в неразборных жидкостных кюветах с окнами из CaF_2 (0,195 мм), а также без растворителя в тонком слое (раздавленная капля).

Квантовохимический расчет геометрических и электронных параметров комплексов ВП с МА проводили в рамках полуэмпирического метода AM1 (пакет программ MOPAC 6 [7]). Оптимизацию индивидуальных молекул и комплексов проводили по всем независимым параметрам с нормой градиента 0.005, частотный анализ выполняли в гармоническом приближении. Конформации комплексов идентифицированы по минимуму энергетического функционала на поверхности потенциальной энергии и по отсутствию в колебательном спектре мнимых частот.

© Фарафонова А.В., Тюрина Т.Г., Макарова Р.А., Зайцева В.В.

Сополимеризацию ВП и МА проводили при 333 К в растворе диоксана с суммарной концентрацией мономеров 3 моль/л и в массе при концентрации АИБН 0,003 и 0,01 моль/л соответственно. Зависимости скорости превращения мономеров в полимер изучали на начальных стадиях до конверсии ~10–12 мас.%. При достижении заданной степени конверсии полимеризацию прерывали охлаждением и последующим высаживанием смеси в диэтиловый эфир. Сополимеры сушили в вакууме до постоянной массы (около 36 часов) при комнатной температуре. Состав полученных сополимеров определяли с использованием элементного анализа (метод Дюма) и потенциометрического титрования.

На рис. 1 показаны электронные спектры смесей ВП и МА в CCl_4 (кривые 1 и 2), в которых наблюдается поглощение в диапазоне 360-400 нм, в то время как для индивидуальных веществ в этой области оно отсутствует (кривые 3 и 4). Полученные результаты не противоречат представленным в работе [8] УФ спектрам этих веществ и их смесей в растворе 1,2-дихлорэтана. Зависимости оптической плотности смеси ВП с МА от обратной концентрации ВП при различных длинах волн, с учетом уравнения (1) позволяют определить величину константы равновесия K_p, значение которой составляет 0,55±0,04 л/моль. Наличие взаимодействия между двумя мономерами подтверждают также данные ^1H ЯМР спектров смесей ВП с МА в CCl_4 (рис. 2). В них обнаружено смещение сигнала протонов МА в

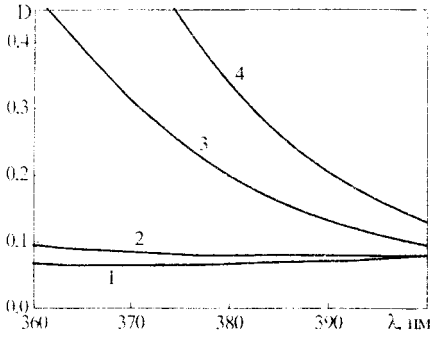


Рис.1. Электронные спектры ВП, МА и их смесей с концентрациями (моль/л): 1 – МА (0,049); 2 – ВП (0,75÷2); 3 – смесь ВП с МА (0,75 и 0,049 соответственно); 4 – смесь ВП с МА (2,00 и 0,049 соответственно)

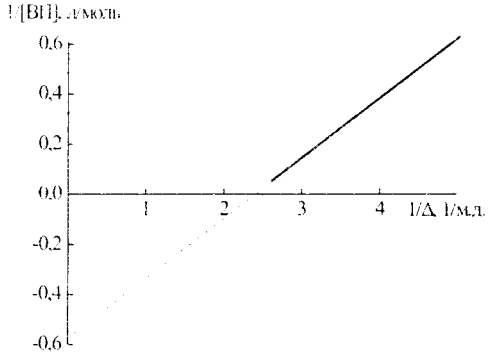


Рис. 2. Зависимость 1/[ВП] от обратной величины химического сдвига протонов МА

слабое поле при добавлении ВП. Величина этого смещения связана с концентрацией ВП прямолинейной зависимостью (рис. 2) в рамках уравнения (2) и Фостера-Файфа, что указывает на состав комплекса 1:1. Согласно уравнению (2), значение K_p равно 0,58±0,06 л/моль. Итак, результаты определения K_p двумя этими методами имеют хорошее соответствие, хотя в работе [3] приведено значение K_p, равное 1,2 л/моль.

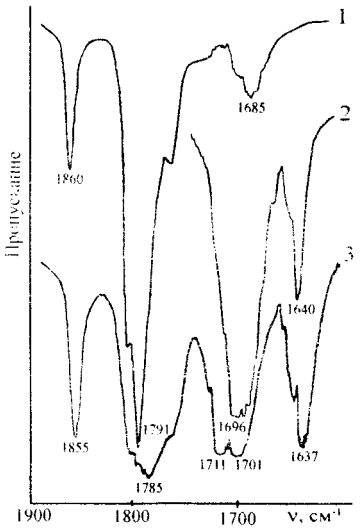


Рис. 3. ИК-спектры МА (1), ВП (2) в растворе хлороформа и смесь МА и ВП (3) без растворителя

Несмотря на обнаруженное для смеси ВП и МА поглощение в области 360-400 нм, которое указывает на взаимодействие между молекулами мономеров, не ясно, какие группы в нем участвуют. Для решения этого вопроса нами проведено изучение ИК спектров смеси ВП и МА в области 1900-1500 $см^{-1}$, характерной для валентных колебаний C=O и C=C групп, и квантово-химический расчет основных параметров структуры комплекса. Анализ ИК спектров растворов смеси при соотношении [ВП]:[МА] 1:1 и индивидуальных мономеров в растворе хлороформа показал, что $\nu_{C=O}$ МА, ВП и $\nu_{C=C}$ ВП смещается в длинноволновую область с 1791 до 1788, с 1696 до 1693, с 1640 до 1638 $см^{-1}$, т.е. на 2-3 $см^{-1}$. Поскольку обнаружено очень малое смещение полос в растворе, то эту смесь изучали без растворителя (раздавленная капля, рис. 3). Оказалось, что полоса поглощения карбонильной группы МА при 1860, положение которой в растворе не изменяется, смещается до 1855 $см^{-1}$, а полоса двойной связи ВП с 1640 до 1637 $см^{-1}$, т.е. на 5 и 3 $см^{-1}$. Это означает, что указанные функциональные группы молекул принимают участие во взаимодействии. Более того, полосы карбонильных групп МА и ВП, на-

ходящиеся при 1791 и 1700 $см^{-1}$, слабо расщепляются в максимуме и расширяются по сравнению с теми же полосами для индивидуальных молекул (рис. 3), при этом их интенсивность уменьшается приблизительно в 3 раза. Вероятно, уменьшение интенсивности может указывать на участие групп C=O обоих мономеров в образовании Н-связей. Изменение полос поглощения валентных колебаний двойной связи предположительно можно отнести к π-π-взаимодействиям.

Действительно, при расположении молекул под углами от 0 до 90° в направлении их двойных связей друг к другу, оказалось, что из множества возможных структур энергетическим минимумам на поверхности потенциальной энергии соответствуют две: комплекс I и II (рис. 4). Оба комплекса характеризуются наличием водородных связей между карбонилом МА и протоном цикла ВП, а также между карбонилом ВП и протоном МА в комплексе I, с расстоянием 2,34 Å и 2,20 Å, меньшим суммы атомных радиусов. На образование водородных связей указано в работах [7, 10] при изучении свойств N-виниламидов. Анализ распределения зарядов на молекулах, образующих комплекс I, показал, что на атомах кислорода O(8) ВП и O(24) МА отрицательный заряд возрастает на 0,042 и 0,026 а.е., соответственно. Положительный заряд на атоме водорода H(13) в цикле ВП и H(25) двойной связи МА увеличивается на 0,024 и 0,033 а.е. Обнаружена также поляризация двойной связи МА и деполяризация ВП. Кроме того, наблюдается увеличение на 0,03 а.е. общего заряда группы HC=CH МА и отсутствие какого-либо изменения зарядов на группе CH_2=CH ВП.

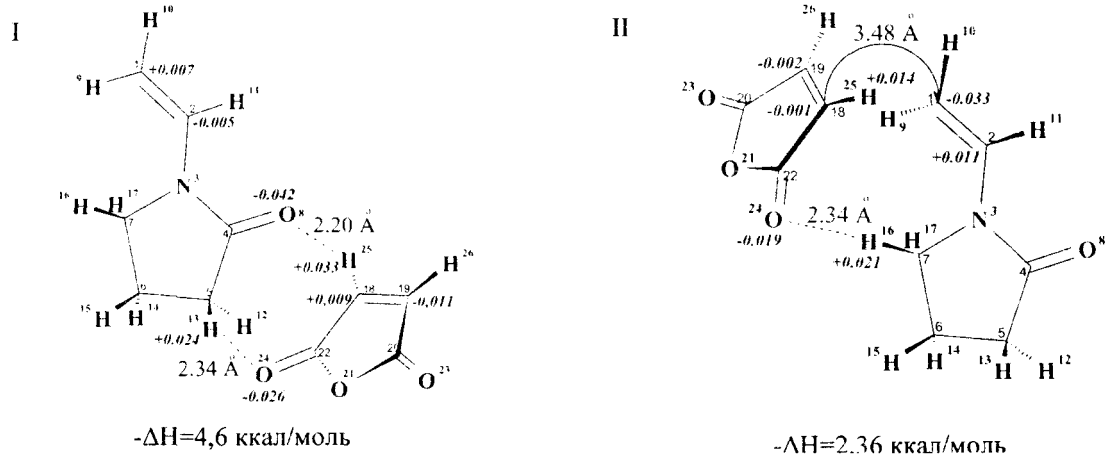


Рис. 4. Оптимизированные структуры комплексов ВП и МА. Показаны расстояния между атомами и наиболее значительные изменения зарядов

Структура комплекса II отличается от I тем, что на атомах двойной связи ВП заряд C(1) уменьшается на 0,033 а.е., а на C(2) возрастает на 0,011 а.е. В то же время на атомах двойной связи МА заряд практически не изменяется. Такое изменение зарядов свидетельствует о том, что комплекс II является, согласно данным работы [11], π-π-комплексом. Наряду с этим в структуре комплекса II между атомом кислорода O(24) МА и протоном цикла H(16) ВП образуется межмолекулярная водородная связь с расстоянием 2,34 Å, таким же, как для подобной Н-связи в структуре I. Такое изменение зарядов на атомах комплексов I и II позволяет нам отнести конфигурацию I к Н-комплексам, а II – к комплексам с двумя типами взаимодействий, как было показано нами ранее [12] при изучении взаимодействия кетенацеталей с МА. Из двух конфигураций комплекса ВП···МА, по нашему мнению, на процесс сополимеризации может оказать большее влияние комплекс II, тем более, что в его структуре атомы двойных связей ВП C(1) и МА C(13) находятся на расстоянии 3,48 Å, тогда как в комплексе I они удалены на 6 Å. Учитывая расположение молекул мономеров в структуре комплекса II и наличие Н-связи, которая будет его стабилизировать, можно предположить, что в стадии роста цепи будут протекать преимущественно реакции с участием комплексно-связанных мономеров. До некоторой степени это подтверждается данными состава сополимеров, полученных в растворе диоксана, которые при соотношении концентраций ВП и МА в исходной смеси 1:1 и 2:1 указывают на получение чередующихся сополимеров (табл.). Однако при избытке ВП ([ВП]:[МА]=2,5:0,5) в сополимере обнаруживается 74,1 мас.% звеньев ВП. Это означает, что при избытке донора в стадии роста цепи принимают участие его молекулы. Поэтому обычно принятое положение о получении чередующихся сополимеров

Таблица. Содержание звеньев ВП и МА в сополимерах, полученных в растворе диоксана.
($\Sigma[M_i]$=3 моль/л, 333 К, 0,003 моль/л, АИБН)

$ВП]_0 : [МА]_0$	ВП, мол.%	МА, мол.%
1,5:1,5	50,0	49,3
2,0:1,0	49,9	44,8
2,5:0,5	74,1	24,3

с участием МА при любом составе исходной смеси для данной системы мономеров неправомерно.

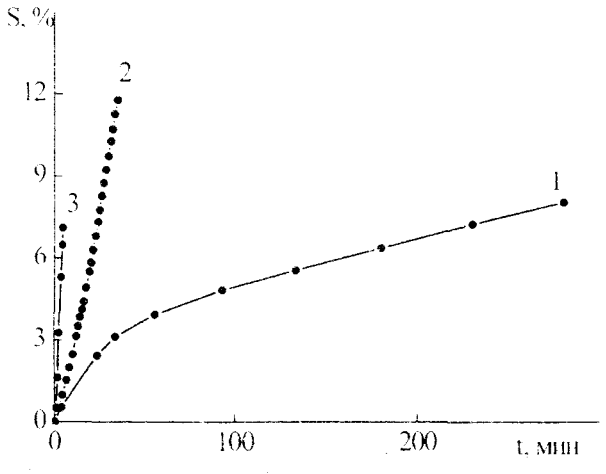


Рис. 5. Зависимость степени конверсии от времени для сополимеризации ВП и МА в диоксане (1, $\Sigma[M]_i$=3 моль/л) и в массе (2, 3) при соотношении ВП:МА = 1:1. Инициатор АИБН (1, 2), ПБ (3)

Интересно отметить, что процесс сополимеризации ВП и МА в диоксане протекает с непостоянной скоростью, которая уменьшается после достижения конверсии ~4 мас.% (рис.5). Замедление скорости накопления полимера связано с уменьшением концентрации комплекса за счет взаимодействия МА с растворителем, с образованием между ними комплекса. В отсутствие растворителя скорость накопления полимера линейна до 12 мас.% и начальная ее величина возрастает в 2,5 раза ($4{,}2\cdot10^{-4}$ и $1{,}66\cdot10^{-4}$ моль/л·с). Однако выход полимера в массе меньше, чем в диоксане. Вероятно, в этом случае некоторую роль играет передача цепи на мономер с образованием олигомерных продуктов, которые теряются при очистке сополимера. Если сополимеризацию ВП и МА проводить в присутствии пероксида бензоила (ПБ), то скорость накопления полимера возрастает приблизительно в 6 раз по сравнению с ее величиной в присутствии АИБН. Можно предположить, что такое ускорение процесса связано с обнаруженным нами [13] образованием комплекса ПБ·МА, поскольку для комплекса ПБ с акрилонитрилом показано [14] увеличение константы скорости распада в ~ 40 раз по сравнению со свободным пероксидом.

Таким образом, проведенные исследования показали, что малеиновый ангидрид и N-винилпирролидон образуют молекулярные комплексы, которые существенно влияют на процесс сополимеризации.

Выводы

1. Получено значение константы комплексообразования малеинового ангидрида с N-винилпирролидоном в растворе CCl_4, равное 0,55±0,04 л/моль (УФ) и 0,58±0,06 л/моль (^{1}H ЯМР). Рассчитаны параметры структуры комплексов ВП···МА (AM1), позволившие выявить образование π-H- и H-комплексов, которые приводят к получению чередующихся сополимеров при соотношении мономеров в исходной смеси 1:1 и 2:1.

2. Стадия роста цепи предположительно протекает с участием реакций комплексно-связанных мономеров и свободного ВП при его пятикратном избытке в реакционной смеси

РЕЗЮМЕ

Досліджено взаємодію малеїнового ангідридриду з N-вінілпіролідоном, визначено константу рівноваги комплексоутворення, що дорівнює 0,55±0,04 л/моль (УФ) та 0,58±0,06 л/моль (^{1}H ЯМР). За допомогою методу ІЧ спектроскопії виявлено, що в утворенні комплексу приймають участь карбонільні групи обох молекул та вінілова група N-вінілпіролідону. Напівемпіричним методом AM1 розраховані ймовірні структури H- та π-H-комплексів. Енергетичні характеристики та зарядове розподілення на атомах мономерів в складі π-H-комплексу вказують на можливість його участі в процесі кополімеризації, що підтверджується утворенням кополімерів еквімольного складу. Виявлено, що пероксид бензоїлу є більш ефективним ініціатором при кополімеризації малеїнового ангідридриду з N-вінілпіролідоном ніж АІБН.

SUMMARY

Interaction between maleic anhydride and N-vinylpyrrolidone was investigated, equilibrium constant of complex formation with value of 0,55±0,04 l/mol (UV) and 0,58±0,06 l/mol (^{1}H NMR) was determined. The participation of carbonyl groups of both molecules and vinyl group of N-vinylpyrrolidone in complexes formation was found by IR spectroscopy. Possible structures H- and π-H-complexes were calculated by AM1 semi empirical method. Energy characteristics and charges distribution at monomer atoms in structure π-H-complex indicate to possible participation of this complex in copolymerization process. This conclusion confirms by formation of copolymers of equal molar composition. It was found that benzoyl peroxide is more effective initiator than AIBN in copolymerization of maleic anhydride and N-vinylpyrrolidone.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cowie J.M.G. Radical initiated alternating copolymerization. Alternating copolymers – New York: Plenum Press, 1985 – P. 19-24.
2. Rzaev Z.M.O. Complex-radical alternating copolymerization // Prog. Polym. Sci. – 2000. – Vol. 25. – P. 163-217.
3. Сивцов Е.В. О реакционной способности N-винильных мономеров / Е.В.Сивцов, Н.А.Лавров, А.Ф. Николаев // Пласт. массы – 2000. – № 3. – С. 9-18.
4. Georgiev G. Role of the charge-transfer complex during the copolymerization of *N*-vinylpyrrolidone and maleic anhydride / G. Georgiev, C. Konstantinov, V. Kabaivanov // Macromolecules. – 1992. – Vol. 25. – P. 6302-6308.
5. Определение абсолютных констант скоростей роста и обрыва цепи при полимеризации N-винилпирролидона / В.А.Агасандян, Э.А.Тросман, Х.С.Багдасарьян и др. // Высокомолекул. соед. – 1978. – Т. 8, № 9. – Р. 1580-1590.
6. Tsuchida E. Solvent Effects on the Alternating Copolymerization Systems / E. Tsuchida, T. Tomoto, H. Sano // Makromolek. Chem. – 1972. – Bd.151. – P.245-264.
7. Stewart J.J.P. Molecular orbital program WinMOPAC. User manual. – 1998. – FUJITSU Ltd. http://www.fujitsu.co.jp/hypertext/
8. Tamura H. Polymerization by the active species produced from the charge transfer complex. IV. Phototerpolymerization of *N*-vinylpyrrolidone, maleic anhydride and methyl methacrylate / H. Tamura, M. Tanaka, N. Murata // Bull. Chem. Soc. Japan. – 1969. – Vol. 42, № 10. – P. 3141.
9. Спектральные эффекты и внутримолекулярные взаимодействия в спектрах ЯМР ^{1}H и ^{13}C пятичленных N-виниллактамов // А.В.Афонин, Б.В.Тржцинская, Н.Д.Абрамова, Е.В.Анакина, А.В.Ващенко // Изв АН СССР. Сер. хим. – 1990. – № 9. – С. 1983-1990.
10. Квантово-химическое исследование водородной связи в димере ε-капролактама / И.А.Гарбузова, Б.В.Локшин // Изв. АН. Сер. хим. – 2004. – № 9. – С. 1818-1825.
11. Мак-Глин С.П. Энергетика молекулярных комплексов // Усп. Химии. – 1960. – Т. 29, вып. 9. – С. 1149-1188.
12. Зайцева В.В. Взаимодействие некоторых циклических кетенацеталей с малеиновым ангидридом и акрилонитрилом / В.В.Зайцева, Т.Г.Тюрина, А.В.Фарафонова, С.Ю.Зайцев // Журн. общ. химии. – 2007. – Т. 77, № 6. – С.961-966.
13. Зайцева В. Взаємодія мономерів з ініціатором при кополімеризації у системі «стирол-акрилонітрил-малеїновий ангідрид» / В. Зайцева, Т. Тюріна, С. Кобзєв // Зб. наук. пр. XI наук. конф. «Львівські хімічні читання» 30 тр. – 1 червн. 2007 р. – Львів, 2007 – С. У50.
14. Многофункциональные мономеры. Синтез и полимеризация (Монография) / С.Ю.Зайцев, В.В.Зайцева. – Донецк: типограф. ООО «Норд Компьютер», 2003. – 296 с.

Надійшла до редакції 06.11.2007 р.

УДК 539.19+536.722-13+541.66

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ В ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ РАСЧЕТАХ. ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ МОНОЗАМЕЩЕННЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ. I АЛКАНЗАМЕЩЕНИЕ

Ю.Б.Высоцкий[*], *А.О.Васильев*[**],
[*] *Донецкий национальный технический университет,*
[**] *Донецкий национальный университет экономики и торговли*

Введение

В работах [5,6] для описания взаимодействия фрагментов молекулы (заместителя и остова) показана возможность использования квантовомеханической теории возмущений и хорошо известной формулы Коулсона – Лонге – Хиггинса, из которой следует

$$\Delta H_{f298} = \Delta H^0_{f298} + q_i^{\text{н}} A_R + {}^1/_2\, \pi_{ii}^{\text{н}} A^2_R + B_R \qquad (1)$$

где ΔH_{f298} – ΔH^0_{f298} – изменение энтальпии образования молекулы при замещении атома водорода заместителем R; $q_i^{\text{н}}$ и $\pi_{ii}^{\text{н}}$ – остаточные заряды и самополяризуемости замещаемого атома водорода в незамещенной молекуле; B_R- аддитивная постоянная характеризующая энтальпию образования заместителя; A_R – параметр, характеризующий возмущение вносимое заместителем в углеводородный остов незамещенной молекулы. В рамках развиваемой модели A_R это эффективное изменение электроотрицательности атома водорода, который замещается на ту или иную функциональную группу. Квантовохимический расчет производится при этом только для незамещенного субстрата, а энтальпии замещенной молекулы находятся на основе разработанной нелинейной корреляционной модели [8]. Отметим, что матрицы само- и взаимных поляризуемостей π_{ik} являются откликом системы на единичное локальное возмущение, т.е. конечномерными функциями Грина невозмущенной системы. Коэффициенты регрессии чувствительны к случайным погрешностям исходных данных, в тоже время наличие выборки самосогласованных экспериментальных данных (полученных в одинаковых экспериментальных условиях) позволяет нивилировать влияние стандартных ошибок измерений.

Методы расчета

Для описания температурной зависимости энтальпии образования замещенных углеводородов на основе формулы Коулсона – Лонге – Хиггинса возможны несколько принципиально разных подхода. Во-первых, возможно введение температуры как параметра в исходные регрессионные выражения. Во-вторых, можно проводить расчет коэффициентов регрессии для соответствующих температур, предполагая справедливость формулы (1) в некотором интервале температур, не содержащем точек фазовых переходов.

$$\Delta H_{fT} = \Delta H^0_{fT} + q_i^{\text{н}} A_{RT} + {}^1/_2\, \pi_{ii}^{\text{н}} A^2_{RT} + B_{RT} \qquad (2)$$

Проведя соответствующие вычисления, получаем таблицу коэффициентов регрессии для каждой температуры. В-третьих, ввиду слабой температурной зависимости энтальпий образования для описания температурной зависимости энтальпии образования преобразуем формулу (1) к виду

$$\Delta H_{f298}(T) = \Delta H^0_{f298}(T) + q_i^{\text{н}} A_R(T) + {}^1/_2\, \pi_{ii}^{\text{н}} B_R(T) + C_R(T) \qquad (3)$$

В коэффициентах формулы (3) учитывается возможность того, что различные слагаемые могут иметь разный вес, т.е. более значимы. Наиболее рациональным способом учета температуры в выражении (3) является разложение коэффициентов регрессии в степенной ряд по температуре.

$$\begin{aligned} A(T) &= A_0 + A_1 T + A_2 T^2 + A_3 T^3, \\ B(T) &= B_0 + B_1 T + B_2 T^2 + B_3 T^3, \\ C(T) &= C_0 + C_1 T + C_2 T^2 + C_3 T^3. \end{aligned} \qquad (4)$$

Тогда для изменения энтальпии образования замещенных углеводородов получаем выражение:

$$\Delta H(T) = q_i A_0 + q_i A_1 T + q_i A_2 T^2 + q_i A_3 T^3 + p_i B_0 + p_i B_1 T + + p_i B_2 T^2 + p_i B_3 T^3 + C_0 + C_1 T + C_2 T^2 + C_3 T^3 \qquad (5)$$

Полученное регрессионное выражение является линейным по всем параметрам и может быть проанализировано в программной среде Excel.

Обсуждение результатов

Первый из предложенных методов описания температурной зависимости ведет к усложнению регрессионных уравнений, потере преимуществ аддитивной схемы (простота модели и минимальное количество параметров), и не дает никакой дополнительной информации.

В качестве объектов исследования во втором и третьем методах выбраны наиболее представительные выборки экспериментальных данных замещенных углеводородов (заместители CH_3, C_2H_5, C_3H_7), а в качестве узловых точек температуры используются температуры для которых имеются самосогласованные выборки экспериментальных данных [1].

© Высоцкий Ю.Б., Васильев А.О.

Результаты расчетов коэффициентов регрессии для этилзамещенных углеводородов по (2) представлены в таблице 1.

Таблица1. Параметры регрессии (2) при различных температурах для этилзамещения

Метод расчета	T / Коэф.	298	300	400	500	600	700	800	900	1000
MINDO3	A_{RT}	185,63	185,85	193,87	201,85	209,64	216,08	221,65	226,10	230,14
	B_{RT}	31,02	31,05	32,54	33,46	33,86	33,98	33,85	33,54	32,96
	R	0,90	0,90	0,91	0,92	0,92	0,93	0,93	0,93	0,93
	S	2,37	2,36	2,34	2,31	2,31	2,30	2,29	2,30	2,30
MNDO	A_{RT}	153,88	154,02	159,54	165,02	170.48	174.91	178,79	181,92	184,73
	B_{RT}	31,42	31,45	33,32	34,65	35,45	35,94	36,13	36,08	35,75
	R	0,97	0,97	0,98	0,98	0,98	0,98	0,98	0,98	0,98
	S	1,28	1,28	1,25	1,23	1,23	1,24	1,24	1,25	1,27
AM1	A_{RT}	176,77	176,94	183,68	190,43	197,17	202,69	207,54	211,45	214,99
	B_{RT}	13,42	13,43	14,39	14,777	14,63	14,32	13,79	13,16	12,30
	R	0,97	0,97	0,97	0,97	0,97	0,97	0,97	0,97	0,97
	S	1,44	1,43	1,42	1,41	1,41	1,42	1,43	1,44	1,46
PM3	A_{RT}	161,71	161,85	167,79	173,72	179,65	184,47	188,70	192,13	195,20
	B_{RT}	22,25	22,28	23,71	24,58	24,93	25,03	24,88	24,55	23,97
	R	0,97	0,97	0,97	0,97	0,97	0,97	0,97	0,97	0,97
	S	1,40	1,40	1,38	1,37	1,38	1,39	1,40	1,41	1,43

Здесь A_{RT} и B_{RT} – коэффициенты регрессии при температуре T, R – коэффициент корреляции, S – стандартное отклонение. Коэффициенты регрессии увеличиваются с ростом температуры, в то время как коэффициент корреляции и среднеквадратичное отклонение значимо не изменяются. Аналогичные результаты получены для пропилзамещения. При метилзамещении в методе PM3 для всех узловых точек температуры коэффициенты B_{RT} незначимы. Средняя ошибка для соответствующих методов составляет MINDO/3 2,42 кДж/моль, PM3 1,45 кДж/моль, AM1 1,49 кДж/моль, MNDO 1,33 кДж/моль. Недостатком этого метода являются необходимость проведения трудоемких вычислений для каждой температуры и наличия самосогласованной выборки экспериментальных данных для каждой температуры. Вычисление значений энтальпий образования при температуре не совпадающей с узловой точкой требует проведения вычислений для двух ближайших узловых точек с последующим интерполированием к нужному значению. Это снижает прогностическую ценность модели и увеличивает ошибку вычислений.

В таблицах 2, 3, 4 представлены соответствующие коэффициенты регрессии в выражении (5) для метил-, этил- и пропилзамещения. Знаком * в таблицах отмечены незначимые коэффициенты регрессии. Коэффициент C_0 в таблицах не указан, т.к. как для данного вида замещения он не значим. Средняя ошибка составляет для MINDO/3 0,65 кДж/моль, PM3 0,85 кДж/моль, AM1 1,14 кДж/моль, MNDO 0,87 кДж/моль.

Таблица 2. Коэффициенты регрессии для метилзамещенных углеводородов

Метод расчета / Коэффициент	MINDO/3	PM3	AM1	MNDO
A_0	175,54±39,82	145,77±41,71	163,81±14,16	148,89±14,18
B_0, 10^{-3}	44,10±2,93	18,99±5,02	*	35,57±1,15
A_1	1,72±0,25	1,69±0,36	1,44±0,20	1,04±0,13
A_2, 10^3	-2,64±0,49	-2,70±0,91	-1,20±0,24	-0,83±0,15
A_3, 10^6	1,30±0,30	1,30±0,61	*	*
B_1, 10^{-3}	3,06±0,20	2,24±0,38	1,90±0,24	1,49±0,18
B_2	-4,87±0,61	-3,67±1,12	-1,61±0,30	-1,23±0,22
B_3, 10^3	2,40±0,43	1,81±0,79	0,037±0,012	*
C_1	-1,29±0,09	-1,19±0,20	-1,01±0,14	-0,68±0.08
C_2, 10^3	2,07±0,26	1,97±0,61	0,84±0,17	0,57±0,10
C_3, 10^6	-1,03±0,18	-0,97±0,43	*	*
R	0,995	0,99	0,98	0,99
S	0,63	0,90	1,17	0,96

Таблица 3. Коэффициенты регрессии для этилзамещенных углеводородов

Метод расчета / Коэффициент	MINDO/3	PM3	AM1	MNDO
A_0	184,64±37.74	160,82±40,98	163,80±54,33	166,33±40,84
B_0, 10^{-3}	78,66±2,86	47,09±5,11	36,88±10,11	65,82±3,47
A_1	1,62±0,23	1,59±0,35	2,18±0,61	1,54±0,37
A_2, 10^3	-2,55±0,47	-2,7±0,89	-3,9E±1,65	-2,70±0,95
A_3, 10^6	1,30±0,29	1,40±0,60	2,00±1,14	1,40±0,65
B_1, 10^{-3}	2,83±0,20	2,10±0,37	2,73±0,68	2,27±0,45
B_2	-4,66±0,58	-3,71±1,10	-4,99±2,03	-4,14±1,33
B_3, 10^3	2,38±0,41	1,90±0,78	2.62±1,43	2,17±0,94
C_1	-1,16±0,08	-1,09±0,20	-1,47±0,38	-1,02±0,21
C_2, 10^3	1,96±0,25	1,97E±0,60	2,73±1,13	1,91±0,63
C_3, 10^6	-1,01±0,18	-1,04±0,42	-1,45±0,79	-1,01±0,44
R	0,997	0,99	0,99	0,99
S	0,60	0,88	1,15	0,85

Таблица 4. Коэффициенты регрессии для пропилзамещенных углеводородов

Метод расчета / Коэффициент	MINDO/3	PM3	AM1	MNDO
A_0	211,77±46,02	189,27±35,85	192,89±52,42	195,59±38,50
B_0, 10^{-3}	113,93±3,53	74,01±4,55	62,54±9,87	97,63±3,37
A_1	1,69±0,29	1,73±0,31	2,52±0,59	1,72±0,35
A_2, 10^3	-2,70±0,58	-2,96±0,78	-4,44±1,59	-3,01±0,90
A_3, 10^6	1,37±0,35	1,50±0,53	2,30±1,1	1,60±0,61
B_1, 10^{-3}	3,00±0,24	2,32±0,32	3,20±0,66	2,57±0,42
B_2	-4,97±0,72	-4,06±0,96	-5,73±1,96	-4,61±1,26
B_3, 10^3	2,53±0,50	2,10±0,68	2,99±1,38	2,40±0,88
C_1	-1,21±0,10	-1,18±0,17	-1,70±0,36	-1,13±0,20
C_2, 10^3	2,08±0,31	2,14±0,52	3,13±1,08	2,11±0,59
C_3, 10^6	-1,08±0,22	-1,12±0,37	-1,64±0,76	-1,11±0,42
R	0,997	0,996	0,99	0,995
S	0,73	0,77	1,11	0,80

Итак по таблицам 2 – 4 видно, что слагаемые с поляризуемостью наиболее значимы.

Отметим, что производные метана в данные выборки не включались, т.к. во всех используемых в работе методах в случае метана существенно упрощается описание электронной структуры, которая определяется в основном симметрией задачи. В итоге включение метана в расчет снижает коэффициент корреляции и повышает стандартное отклонение.

Видно, что использование для описания температурной зависимости энтальпий образования монозамещенных углеводородов разложения коэффициентов регрессии в степенной ряд по температуре не только позволяет значительно сократить временя расчетов, но и приводит к повышению коэффициента корреляции и снижению среднеквадратичной ошибки описания экспериментальных данных в среднем в полтора раза, а для метода MINDO/3 в 3,72 раза.

Таблица 5. Энтальпии образования монозамещенных углеводородов

T	Незамещ. молекула	R=	CH_3			C_2H_5			C_3H_7		
		Метод расчета	I	II	Эксп.	I	II	Эксп.	I	II	Эксп.
298	C_2H_2	MINDO/3	182,63	185,46	185,43	162,53	165,22	165,18	141,49	144,47	144,35
		MNDO	183,07	184,83		162,92	164,97		141,65	144,12	
		AM1	182,97	184,27		162,85	164,37		141,57	143,93	
		PM3	183,04	185,42		162,93	165,22		141,64	144,33	
	C_2H_4	MINDO/3	25,33	19,28	20,418	4,76	-1,07	-0,13	-16,05	-22,47	-20,92
		MNDO	24,67	22,89		4,12	2,05		-16,72	-19,21	
		AM1	25,40	24,23		4,83	3,69		-16,00	-17,70	
		PM3	25,38	22,43		4,82	1,94		-16,02	-19,37	
	C_6H_6	MINDO/3	58,59	51,99	49,99	37,94	31,60	29,79	17,17	10,19	7,82
		MNDO	52,48	49,74		32,00	28,78		11,08	7,22	
		AM1	52,56	49,46		32,09	29,27		11,16	6,86	
		PM3	52,20	48,85		31,74	28,48		10,79	6,99	
	C_3H_8-1	MINDO/3	-125,05	-125,04	-126,15	-145,34	-145,68	-146,44	-166,53	-166,29	-167,19
		MNDO	-124,67	-124,35		-145,63	-144,96		-166,05	-165,52	
		AM1	-124,64	-124,02		-145,35	-145,03		-166,04	-165,40	
		PM3	-124,64	-124,26		-145,24	-145,02		-166,04	-165,60	
500	C_2H_2	MINDO/3	178,18	181,33	181,08	155,37	158,29	158,07	132,20	135,42	135,10
		MNDO	178,80	181,06		156,05	158,09		132,63	135,13	
		AM1	178,69	180,92		155,97	157,95		132,54	134,93	
		PM3	178,78	181,34		156,06	158,42		132,62	135,41	
	C_2H_4	MINDO/3	16,82	10,06	11,72	-6,24	-12,60	-11,3	-29,39	-36,35	-34,43
		MNDO	16,18	13,94		-6,83	-8,93		-30,03	-32,55	
		AM1	16,95	15,20		-6,08	-7,42		-29,26	-31,00	
		PM3	16,93	13,70		-6,10	-9,09		-29,29	-32,79	
	C_6H_6	MINDO/3	46,39	39,01	37,87	23,28	16,37	15,52	0,14	-7,43	-8,79
		MNDO	39,98	36,49		17,01	13,77		-6,22	-10,15	
		AM1	40,06	35,92		17,10	13,56		-6,14	-10,54	
		PM3	39,68	36,02		16,73	13,34		-6,52	-10,49	
	C_3H_8-1	MINDO/3	-139,20	-139,18	-140,21	-161,84	-162,21	-162,93	-185,50	-185,24	-186,10
		MNDO	-138,80	-138,30		-162,20	-161,49		-185,03	-184,48	
		AM1	-138,77	-138,41		-161,89	-161,31		-185,01	-184,35	
		PM3	-138,77	-138,36		-161,78	-161,55		-185,02	-184,55	
1000	C_2H_2	MINDO/3	170,73	173,85	173,76	145,14	148,17	148,03	120,10	123,36	123,14
		MNDO	171,87	173,28		146,26	1408,00		120,97	123,10	
		AM1	171,77	172,52		146,17	147,37		120,86	122,87	
		PM3	171,87	174,11		146,28	148,42		120,97	123,47	
	C_2H_4	MINDO/3	6,02	-0,39	0,17	-19,37	-25,61	-24,85	-44,58	-51,33	-49,96
		MNDO	5,48	4,17		-19,89	-21,63		-45,14	-47,27	
		AM1	6,31	5,25		-19,06	-19,76		-44,31	-45,74	
		PM3	6,27	3,51		-19,10	-21,75		-44,35	-47,45	
	C_6H_6	MINDO/3	32,54	25,52	25,15	7,17	0,37	-0,21	-18,06	-25,41	-26,48
		MNDO	25,76	23,70		0,34	-2,35		-24,92	-28,22	
		AM1	25,83	23,40		0,41	-1,48		-24,86	-28,48	
		PM3	25,43	22,31		0,01	-2,98		-25,26	-28,77	
	C_3H_8-1	MINDO/3	-154,97	-154,96	-155,85	-179,69	-180,15	-180,75	-205,56	-205,33	-206,06
		MNDO	-154,58	-154,23		-180,14	-179,49		-205,08	-204,62	
		AM1	-154,55	-154,33		-179,80	-179,46		-205,06	-204,52	
		PM3	-154,55	-154,20		-179,67	-179,51		-205,06	-204,66	

В таблице 5 в качестве иллюстрации представлены расчеты ΔH_f кДж/моль для четырех замещенных молекул углеводородов различных классов и трех заместителей в трех узловых точках температуры, которые сопоставляются с имеющимися экспериментальными значениями. В таблице 5 знаком I помечены значения вычисленные по выражению (2), знаком II расчет проведен по формуле (5).

Выводы

Таким образом, развитая ранее модель описания влияния заместителей на энтальпии образования углеводородов [5;6] применима для описания температурной зависимости энтальпии образования в рамках различных полуэмпирических методов (MINDO/3, MNDO, AM1 и PM3) квантовой химии.

Разложение коэффициентов в степенной ряд по температуре позволяет значительно сократить время расчетов и получить функциональные зависимости всех параметров регрессии от температуры в явном виде для дальнейшего теоретического изучения.

Модель (5) позволяет проводить расчет в большом непрерывном диапазоне температур (298-1000 К), не содержащем точек фазовых переходов.

Для рассмотренных алканзамещенных углеводородов во всех полуэмпирических методах среднеквадратичная ошибка описания эксперимента составляет менее 1 ккал/моль.

РЕЗЮМЕ

Модель опису впливу замісників на ентальпії утворення вуглеводнів, яка була розглянута раніше, використана для опису температурної залежності ентальпій утворення моноалканзаміщенних вуглеводнів в межах різноманітних полуемпірічних методів (MINDO/3, MNDO, AM1 і PM3) квантової хімії. Проведено порівняльний аналіз методів опису температурної залежності ентальпій утворення вуглеводнів. Розроблена методика розрахунку ентальпій утворення монозаміщенних вуглеводнів у широкому неперервному діапазоні температур. Середньоквадратична помилка опису експерименту менше ніж 1 ккал/моль.

SUMMARY

Model of description of influencing of deputies on entalpy of formation hydrocarbons, which was considered earlier, used for description of temperature dependence of entalpy of formation of monoalkansubstituted hydrocarbons in various semiempirical methods (MINDO/3, MNDO, AM1 and PM3) of quantum chemistry. The comparative analysis of methods of description of temperature dependence of entalpy of formation hydrocarbons is conducted. Developed method of calculation entalpy of formation of monosubstituted hydrocarbons in the wide continuous range of temperatures. It is shown that the root-means-square errors of description of experiment is less more than one kcal/mol.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Stull D.R., Westrum E.F.Jr., Sinke G.C. The chemical thermodynamics of organic compounds. N.-Y., John Wiley&Sons, 1969. – 536 p.
2. Татевский В.М. Строение молекул. – М.: Химия, 1977. – 512 с.
3. Киреев В.А. Методы практических расчетов в термодинамике химических реакций. – М.: Химия, 1975. – 535 с.
4. Bensan S.W. Thermochemical kinetics. N.-Y., John Wiley&Sons, 1976. – 498 p.
5. Высоцкий Ю.Б., Эйлазян Э.Г. К расчету энтальпий образования монозамещенных углеводородов // Теор. и эксперим. химия. 1991. – Т.27. – №5. – С.633-637.
6. Высоцкий Ю.Б., Эйлазян Э.Г. Эффекты заместителей в химической термодинамике. Энтальпии образования замещенных углеводородов // Журнал физической химии. 1992. – Т.66. – С. 2870-2875.
7. Рид Р., Праусниц Д., Дервуд Т., Свойства газов и жидкостей. – Л.: Химия, 1982. – 592 с.
8. Высоцкий Ю.Б., Эйлазян Э.Г. К оценке параметров многофакторных двухпараметрических нелинейных моделей химической термодинамики // Заводская лаборатория. 1993. – №1. – С.66-69.

Надійшла до редакції 23.05.2007 р.

УДК 539.192

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИМЕРИЗАЦИИ ФТОРСПИРТОВ $C_nF_{2n+1}C_kH_{2k+1}OH$ НА ПОВЕРХНОСТИ РАЗДЕЛА ФАЗ ВОДА/ПАР

Ф.Л.Болдырева[*], *Е.А.Беляева*[**], *Ю.Б.Высоцкий*[**],
[*]*Донбасская национальная академия строительства и архитектуры,*
[**]*Донецкий национальный технический университет*

Введение

Фторсодержащие вещества широко используют в материаловедении, медицине и применяют в качестве растворителей, поверхностно-активных, теплоизоляционных веществ, веществ переносящих кислород в крови и т.д. [1-3]. Свойства этих соединений, в конечном счете определяются пространственным строением их молекул. Вполне естественно, что соединения данного класса и их широкое применение вызывает большой интерес к изучению этих систем.

В наших предыдущих работах были рассчитаны термодинамические параметры кластеризации насыщенных спиртов нормального строения $C_nH_{2n+1}OH$ [4-5] и фторспиртов следующего строения $C_nF_{2n+1}CH_2CH_2OH$ [6-7] на поверхности раздела фаз вода/пар. В первом случае основной вклад в образование кластеров вносят только парные межмолекулярные водород-водородные взаимодействия, во втором – лишь межмолекулярные фтор-фтор взаимодействия. Вызывает интерес, сохраняются ли полученные ранее термодинамические закономерности кластеризации соединений, которые при кластерообразовании образуют как межмолекулярные H-H-связи так и F-F-связи. Данная работа является началом этих исследований: в ней была изучена димеризация соединений $C_nF_{2n+1}C_kH_{2k+1}OH$ с числом CH_2-групп (k=4÷14), длина фторуглеводородной части, число групп CF_2 в которой совпадает с количеством межмолекулярных F- F – взаимодействий, изменялась от пяти до четырнадцати атомов углерода (n=5÷14). В дальнейшем будут рассчитаны параметры кластеризации данного класса соединений.

Методы расчета

В представленной работе все расчеты проводились в рамках полуэмпирического метода PM3, так как, во-первых, данный метод достаточно хорошо воспроизводит термодинамические параметры [6], а, во-вторых, из всех полуэмпирических методов только PM3 учитывает межмолекулярные водород-водордные взаимодействия, позволяя адекватно описывать процесс кластеризации молекул ПАВ жирного ряда на поверхности раздела фаз вода/пар.

Оптимизация геометрических структур мономеров и димеров была проведена в рамках программного комплекса Морас2000, при этом был использован BFGS алгоритм, позволяющий корректно рассчитать параметры для соединений содержащих межмолекулярные связи [8]. Как уже указывалось в работах [4-6], для комплексов с межмолекулярными связями характерны колебания с частотой менее 100 $см^{-1}$, которые не учитываются при расчетах в Морас2000, поэтому соответствующие вклады были рассчитаны отдельно.

Обсуждение результатов

Мономеры. В работе [6] путем проведения конформационного анализа была определена наиболее устойчивая конформация мономера фторспиртов. Полученный конформер характеризуется величиной торсионного угла CCOH 300^0 (данный угол образован функциональной группой и радикалом). Поэтому в настоящей работе за основу были взяты соединения с данной величиной торсионного угла.



Рис.1. Оптимизированная структура наиболее энергетически выгодного мономера полифторспиртов на примере молекулы $C_{28}H_{28}F_{29}OH$

На рис.1 приведена геометрическая структура мономера с указанными геометрическими параметрами.

Затем были рассчитаны стандартные энтальпия, энтропия и свободная энергия образования мономеров из простых веществ, величины которых представлены в табл.1.

© Болдырева Ф.Л., Беляева Е.А., Высоцкий Ю.Б.

Таблица 1. Термодинамические характеристики образования мономеров фторспиртов $C_nF_{2n+1}C_kH_{2k+1}OH$ (T=298K)

k	n	ΔH_1, кДж·моль$^{-1}$	ΔS_1, Дж·моль$^{-1}$K^{-1}	ΔG_1,кДж·моль$^{-1}$
5	4	-2570,98	-1221,72	-2206,91
6	4	-2976,14	-1379,41	-2565,08
7	4	-3381,44	-1536,15	-2923,67
8	4	-3786,65	-1693,51	-3281,99
9	4	-4191,67	-1851,00	-3640,07
10	4	-4597,02	-2008,55	-3998,47
11	4	-5002,16	-2165,14	-4356,95
12	4	-5407,37	-2322,44	-4715,28
13	4	-5812,53	-2480,17	-5073,44
14	4	-6217,70	-2637,55	-5431,71
5	6	-2617,20	-1430,68	-2190,86
6	6	-3022,44	-1587,81	-2549,27
7	6	-3427,68	-1745,31	-2907,58
8	6	-3832,74	-1902,76	-3265,72
9	6	-4238,10	-2059,13	-3624,48
10	6	-4643,25	-2216,72	-3982,67
11	6	-5048,4	-2374,78	-4340,72
12	6	-5453,34	-2531,18	-4699,05
13	6	-5858,88	-2688,56	-5057,69
14	6	-6263,98	-2846,56	-5415,71
5	8	-2662,89	-1640,00	-2174,17
6	8	-3068,12	-1797,37	-2532,51
7	8	-3473,37	-1954,52	-2890,92
8	8	-3878,53	-2111,40	-3249,33
9	8	-4283,71	-2268,46	-3607,71
10	8	-4688,93	-2425,98	-3965,99
11	8	-5094,16	-2583,36	-4324,32
12	8	-5499,35	-2740,93	-4682,55
13	8	-5904,57	-2898,14	-5040,93
14	8	-6309,71	-3055,44	-5399,19
5	10	-2708,4	-1849,96	-2157,11
6	10	-3113,58	-2007,56	-2515,33
7	10	-3518,84	-2164,88	-2873,71
8	10	-3924,05	-2321,55	-3232,23
9	10	-4328,99	-2476,04	-3591,13
10	10	-4734,43	-2636,08	-3948,88
11	10	-5139,65	-2792,53	-4307,48
12	10	-5544,88	-2951,93	-4665,21
13	10	-5949,58	-3106,21	-5023,93
14	10	-6354,66	-3260,49	-5383,04
5	12	-2753,78	-2060,55	-2139,74
6	12	-3159,10	-2216,87	-2498,47
7	12	-3564,32	-2374,46	-2856,73
8	12	-3969,47	-2530,70	-3215,32
9	12	-4374,46	-2685,33	-3574,23
11	12	-5184,73	-3003,50	-4289,69
12	12	-5590,21	-3161,89	-4647,97
13	12	-5994,87	-1221,72	-5006,04
14	12	-6399,93	-1379,41	-5364,63
5	14	-2799,19	-1536,15	-2122,48
6	14	-3204,42	-1693,51	-2480,90
7	14	-3609,53	-1851,00	-2838,86
8	14	-4014,90	-2008,55	-3197,79
10	14	-4597,02	-2322,44	-3592,18
11	14	-4643,25	-2480,17	-3595,46
k	n	ΔH_1, кДж·моль$^{-1}$	ΔS_1, Дж·моль$^{-1}$K^{-1}	ΔG_1,кДж·моль$^{-1}$
12	14	-4688,93	-2637,55	-3597,86
13	14	-4734,43	-!430,68	-3599,84
14	14	-4825,04	-1587,81	-3665,78

В представленной таблице, в качестве иллюстрации, показаны термодинамические параметры образования для мономеров с четным числом CH_2-групп. Используя полученные значения, как для четного так и для нечетного числа k, были получены регрессионные зависимости стандартных энтальпии и энтропии от числа CH_2 и CF_2-групп. Данные зависимости, имеющие линейный характер, представлены ниже:

$\Delta H_1 = -(454,65\pm0,12) - (405,17\pm0,01)\cdot n - (22,78\pm0,01\cdot k$, (N=110, R= 0,9999, S = 0.27 кДж/моль) (1)

$\Delta S_1 = (254,64\pm0,53) + (51,41\pm0,04)\cdot n + (31,48\pm0,04\cdot k$, (N=110, R= 0,999, S = 1,27Дж/моль) (2)

Здесь N – число точек, S – стандартное отклонение, R – коэффициент корреляции.

Сравнение угловых коэффициентов, полученных для CH_2-групп с соответствующими значениями, полученными ранее для спиртов, тиоспиртов, карбоновых кислот и аминов, показывает, что они практически совпадают. Так угловые коэффициенты энтальпии образования для перечисленных классов соединений составили -22,67÷-22,68 кДж/моль, а для рассмотренных фторспиртов– -22,78 кДж/моль, что связано, по всей видимости с наличием фторуглеродной части радикала. Различие в значениях угловых коэффициентов энтропий несколько выше (39,08 Дж/моль·К для тиоспиртов [9], 38,40 Дж/моль·К для карбоновых кислот [10], 39,28 Дж/моль·К для аминов [11] и 31,48 Дж/моль·К для изученных соединений (см. зависимости 1 и.2). Сравнение угловых коэффициентов, рассчитанных для CF_2-групп также показало, что они практически совпадают с рассчитанными ранее в [6,7] и в данной работе (см. зависимости 1 и.2): для энтальпий образования -405,20 кДж/моль и -405,17 кДж/моль, для энтропий – 51,48 Дж/моль·К и 51,40 Дж/моль·К соответственно).

Димеры. Конформационный анализ, проведенный для димеров изученных в работе фторспиртов, показал, что и для них наиболее устойчивой является структура с координатами торсионных углов ССОН $300^0_300^0$. Это видно из приведенной на рис.2 поверхности потенциальной энергии.

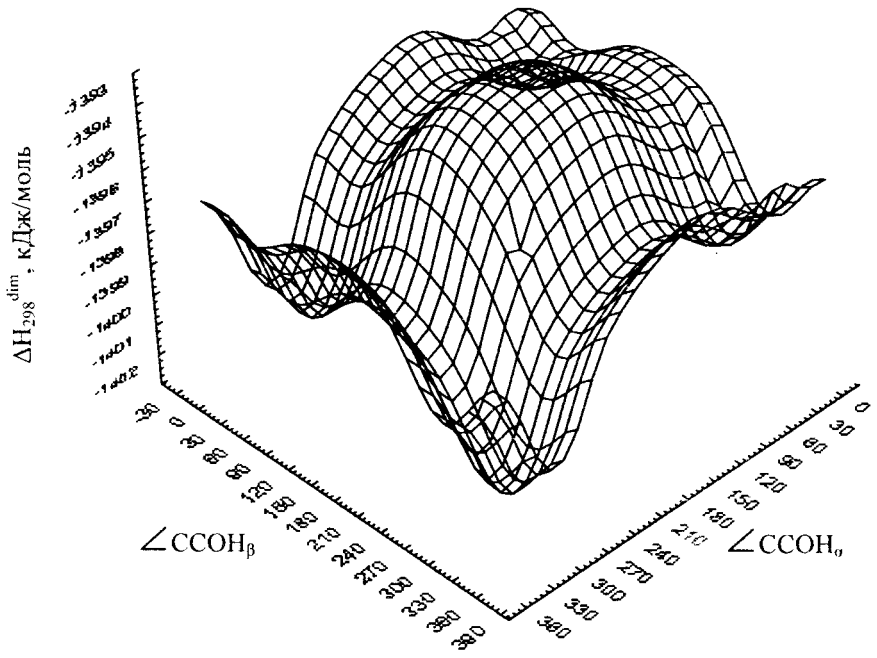


Рис. 2. Поверхность потенциальной энергии димера фторспиртов $C_{10}F_{21}C_6H_{13}OH$

Для всех изучаемых структур были рассчитаны термодинамические параметры их образования, а также стандартные изменения энтальпии, энтропии и энергии Гиббса димеризации. Вычисления проводили по следующим формулам: $\Delta H^{dim}_{298} = \Delta H_2 - 2\cdot\Delta H_1$ (энтальпия димеризации), $\Delta S^{dim}_{298} = S_2 - 2\cdot S_1$ (энтропия димеризации), $\Delta G^{dim}_{298} = \Delta H^{dim}_{298} - T\cdot\Delta S^{dim}_{298}$ (свободная энергия димеризации), где ΔH_2 и S_2 – энтальпия образования и абсолютная энтропия соответствующих димеров, а ΔH_1 и S_1 – энтальпия образования и абсолютная энтропия соответствующих мономеров. Все значения приводятся в табл.2.

Таблица 2. Термодинамические параметры димеризации фторспиртов $C_nF_{2n+1}C_kH_{2k+1}OH$ (T=298K)

k	n	ΔH^{dim}_{298}, кДж·моль$^{-1}$	ΔS^{dim}_{298}, Дж·моль$^{-1}$K^{-1}	ΔG^{dim}_{298},кДж·моль$^{-1}$
5	4	-72,48	-261,05	5,31
6	4	-85,05	-284,12	-0,38
7	4	-96,17	-297,98	-7,37
8	4	-106,70	-300,83	-17,06
9	4	-118,00	-310,79	-25,39
10	4	-128,22	-333,26	-28,91
5	5	-76,86	-292,48	10,29
6	5	-89,33	-296,49	-0,97
7	5	-101,40	-315,20	-7,47
8	5	-112,56	-314,24	-18,92
9	5	-122,12	-336,12	-21,96
10	5	-133,48	-342,42	-31,44
5	6	-85,42	-306,37	5,88
6	6	-98,15	-316,97	-3,70
7	6	-109,40	-327,16	-11,91
8	6	-119,30	-336,11	-19,14
9	6	-131,01	-349,73	-26,79
10	6	-140,67	-361,61	-32,91
5	7	-96,79	-316,62	-2,44
6	7	-107,02	-321,23	-11,29
7	7	-118,56	-336,43	-18,30
8	7	-129,26	-359,19	-22,23
9	7	-140,46	-377,92	-27,84
10	7	-150,57	-386,78	-35,31
5	8	-74,68	-283,60	9,84
6	8	-87,09	-293,87	0,49
7	8	-98,76	-307,59	-7,10
8	8	-109,82	-321,25	-14,08
9	8	-120,61	-334,67	-20,88
10	8	-131,72	-349,71	-27,51
5	9	-82,56	-284,08	2,10
6	9	-96,44	-312,85	-3,21
7	9	-107,62	-327,07	-10,15
8	9	-118,36	-339,78	-17,11
9	9	-128,98	-352,73	-23,87
10	9	-138,26	-362,26	-30,31
5	10	-92,23	-311,69	0,66
6	10	-106,08	-334,68	-6,35
7	10	-117,34	-348,42	-13,51
8	10	-127,81	-357,34	-21,33
9	10	-138,75	-375,33	-26,90
10	10	-149,35	-386,81	-34,08

В табл.2 приведены термодинамические характеристики димеризации до 10 CH_2- и 10 CF_2-групп, геометрическая структура исследуемого димера представлена на рис.3.

Так как димеры исследуемых соединений, как отмечалась выше, характеризуются наличием как H-H, так и F-F межмолекулярных связей, то регрессионные зависимости были построены от числа этих взаимодействий. Ниже приведены соответствующие объединенные корреляционные зависимости:

$\Delta H_{298}^{dim} = -(5,75 \pm 2,23) - (10,87 \pm 0,17)\cdot n - (7,44 \pm 0,42)\cdot K_a$ (N =56; R = 0,994; S = 3,04) (3)

$\Delta S_{298}^{dim} = -(181,31 \pm 7,64) - (12,44 \pm 0,58)\cdot n - (16,05 \pm 1,44)\cdot K_a$ (N =56; R = 0,95; S = 10,42) (4)



Рис.3. Оптимизированная геометрическая структура димера фторспиртов

Видим, что значения угловых коэффициентов для энтальпии и энтропии CH_2-групп в целом отличаются от рассчитанных ранее для спиртов, тиоспиртов, карбоновых кислот и аминов: так для спиртов они составили соответственно -10,30 и -17,86 [4-5]; для тиоспиртов -9,78 и -17,75 [6]; для кислот -10,28 и -22,52 [7]; для аминов -10,11 и -24,49 [8], причем для энтропии эта разница менее ощутима. А для исследуемых соединений данные коэффициенты составили -7,44 и -16,05 (см. зависимости 3 и 4). Что говорит о том, что этот тип H-H-взаимодействия нельзя характеризовать как наиболее энергетически выгодный «а»-тип [4]. Такие различия возможно обусловлены наличием спиралевидной конформации фторуглеродной части радикала, которая, по всей видимости, влияет на характер межмолекулярных водород-водородных взаимодействий.

Были построены зависимости энтальпии, энтропии и энергии Гиббса димеризации от числа CF_2-групп. Они имеют линейный характер и эквидистантны.

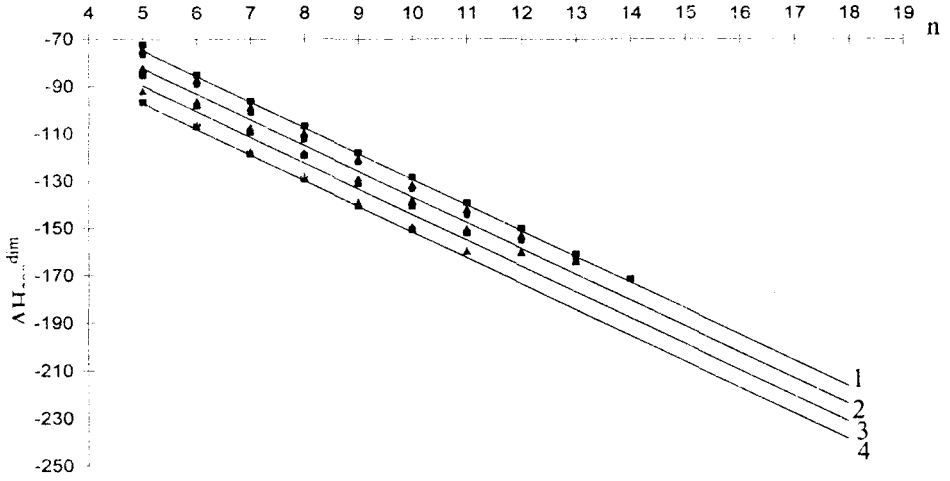


Рис.4. Зависимость стандартной энтальпии димеризации от длины фторированной цепи, содержащей (1) – 4 CH_2-группы, (2) – 6 CH_2-групп, (3) – 8 CH_2-групп, (4) – 10 CH_2-групп

Из рис. 4 видно, что результаты прямого расчета (обозначены точками) хорошо лежат на регрессионных прямых. Одинаковый угол наклона прямых характеризует одинаковый характер межмолекулярных фтор-фтор взаимодействий. Аналогичные зависимости имеют место и для энтропии димеризации. Следует отметить, что зависимости для рассчитанных термодинамических характеристик совпадают для четного и нечетного ряда с одинаковыми {k/2}, где {} обозначает целую часть числа. Это связано с тем, что такие димеры имеют одинаковое количество межмолекулярных H-H-взаимодействий.

Эквидистантность прямых указывает на то, что введение в цепь фиксированного числа CH_2-групп (в данном случае двух) ведет к изменению энергии на определенную величину, т.е. стандартные энтальпии, энтропии, а значит и свободные энергии, могут быть рассчитаны как сумма инкрементов групп, входящих в состав соединения. При фиксированном числе CF_2-групп имеется линейная зависимость данных термодинамических характеристик от числа CH_2-групп.

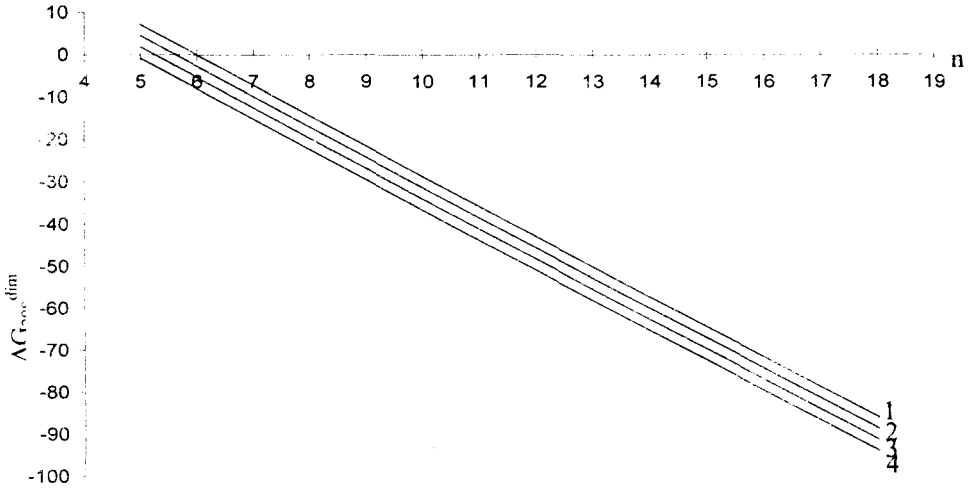


Рис.5. Зависимость стандартной энергии Гиббса димеризации от длины фторированной цепи, содержащей (1) – 4 CH_2-группы, (2)- 6 CH_2-групп, (3) – 8 CH_2-групп, (4) – 10 CH_2-групп

Зависимость изменения энергии Гиббса кластеризации от числа CF_2-групп, представленная на рис.5, показывает, что и рост углеводородной и фторированной частей радикала понижает значение энергии Гиббса димеризации.

Выводы

Таким образом, в данной работе в рамках полуэмпирического метода PM3 были рассчитаны термодинамические параметры димеризации ряда фторспиртов с различным числом CH_2-групп и CF_2-групп на поверхности раздела фаз вода/пар. Коэффициенты корреляционных зависимостей мономеров, имеющие линейный характер, превышают 0,999, а стандартные отклонения ΔH^0_{298} и S^0_{298} составили соответственно 0,27 кДж/моль и 1,27 Дж/моль·К.

Показано, что термодинамические параметры димеризации исследуемых соединений линейно зависят от числа CF_2-групп и ступенчато от числа CH_2-групп, что свидетельствует, что H-H и F-F межмолекулярные взаимодействия вносят аддитивный вклад в значения энтальпии, энтропии и свободной энергии димеризации. Коэффициенты корреляционных зависимостей энергий димеризации превышают 0,90, а стандартные отклонения для ΔH^0_{298} и S^0_{298} составили 3,04 кДж/моль и 10,42 Дж/моль·К соответственно.

РЕЗЮМЕ

У рамках напівемпіричного методу PM3 було проведено конформаційний аналіз мономерів і димерів нормальних фторспиртів з варіюванням кількості CH_2- та CF_2-груп. Було побудовано поверхню потенційної енергії димерів від значення відповідних торсійних кутів. Для отриманих найбільш енергетично вигідної конформації димеру, що відповідає глобальному мінімуму, біло розраховано термодинамічні параметри (ентальпії, ентропії та енергії Гіббса) димеризації. Наведені значення лінійно залежать від кількості CF_2-груп і східчасто від кількості CH_2-груп.

SUMMARY

In frameworks semiempirical method PM3 the conformation analysis of monomers and dimers normal fluoroalkanols was conducted. The surfaces of potential energy of dimers on torsion angles were constructed. For conformstion of dimer corresponding to global minimum thermodynamic parameters (enthalpy, entropy and energy of the Gibbs) were calculated. The dependences of these values are linear on the number of CF_2- and are stepwise on the number of CH_2-groups.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Watkins E.K., Jorgensen W.L. Perfluoralkanes: Conformational Analysis and Liquid –State Properties from ab Initio and Monte Carlo Calculations // J. Phys. Chem. A, 2001. – V105. P.4118-4125.
2. Binks B.P., Fletcher P.D.I., Kotsev S.N, Tompson R.L. Adsorption and aggregation pf Semifluorinated alkanes in binary and ternary mixtures with hydrocarbon and fluorocarbone solvents // American Chemical Society 1997. – V.13. – P.6669-6682.
3. Rothlisberger U., Laasonen K., Klein M.L., The torsional potential of perfluoro *n*-alkanes: A density functional study // J. Phys. Chem. 1996. – V 104, №10. – P.3692.
4. Vysotsky Yu. B., Bryantsev V. S., Fainerman V. B. Quantum Chemical Analysis of the Thermodynamics of 2D Cluster Formation of Odd n-Alcohols at the Air/Water Interface // J. Phys. Chem. B, 2002. – V. 106. – P.11285-11294.
5. Vysotsky Yu. B., Bryantsev V.S., Fainerman V.B., Vollhardt D., Miller R. Quantum chemical semi-empirical approach to the thermodynamic characteristics of oligomers and large aggregates of alcohols at the water/air interface // Colloids and Surfaces, A: Physicochemical and Engineering Aspects 209 (2002). – P.1-14.
6. Vysotsky Yu. B., Bryantsev V.S., Boldyreva F.L., Fainerman V.B., and Vollhardt D. Quantum Chemical Semiempirical Approach to the Structural and Thermodynamic Characteristics of Fluoroalkanols at the Air/Water Interface // J. Phys. Chem. B, 2005. – V. 109. – P. 454-462.
7. Высоцкий Ю.Б., Брянцев В.С., Болдырева Ф.Л. Конформационный анализ мономеров и димеров фторспиртов $C_nF_{2n+1}CH_2CH_2OH$ в рамках полуэмпирического метода PM3 // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: хімія і хімічна технологія. 2006, в.108. – С. 34-46
8. Stewart, J. J. P. MOPAC 2000.00 Manual. Fujitsu Limited: Tokyo, Japan,1999.
9. Vysotsky Yu. B., Belyaeva E. A., Fainerman V. B., Vollhardt D., and Miller R. Quantum Chemical Analysis of the Thermodynamics of 2D Cluster Formation of *n*-thioalcohols at the Air/Water Interface // in print
10. Vysotsky Yu. B., Muratov D. V., Boldyreva F. L., Fainerman V.B., Vollhardt D. and Miller R. Quantum Chemical Analysis of the Thermodynamics of 2D Cluster Formation of *n*-Carboxy Acids at the Air/Water Interface // J. Phys. Chem. B, 2006. – V. 110. – P. 4717-4730
11. Vysotsky Yu. B., Belyaeva E. A., Fainerman V. B., Vollhardt D., and Miller R. Quantum Chemical Analysis of the Thermodynamics of 2D Cluster Formation of Single Chain Fatty Amines at the Air/Water Interface // in print.

Надійшла до редакції 14.05.2007 р.

УДК 539.192

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ТЕРМОДИНАМИКИ ДИМЕРИЗАЦИИ ЗАМЕЩЕННЫХ МЕЛАМИНОВ НА ПОВЕРХНОСТИ РАЗДЕЛА ФАЗ ВОДА/ПАР

А.А.Швед, Ю.Б.Высоцкий,*
Донецкий национальный технический университет

Введение

Большое количество биологичных процессов основаны на законах биомолекулярного распознавания путем комплементарности водородных связей. В частности, молекулярные взаимодействия отвечают за стабилизацию ДНК и РНК [1]. Моделирование биологических мембран, в первую очередь, связано с изучением процессов на поверхности раздела фаз, простейшим из которых являются исследование поверхности раздела вода/пар [2]. Особый интерес представляет теоретическое и экспериментальное исследование термодинамических параметров кластеризации, позволяющее с высокой степенью точности прогнозировать поведение соединений того или иного класса на границе раздела фаз, в частности, зависимость начала кластеризации от длины цепи углеводородного радикала. В качестве первого этапа изучения кластеризации служит исследование димеризации соединений исследуемого ряда, что является целью настоящей работы.

Все расчеты проводились в рамках полуэмпирического метода PM3. Известно, что метод PM3 был получен репараметризацией метода AM1, в частности, приблизительно на 40% была увеличена точность расчета теплот образования. Оптимизация геометрических структур мономеров и димеров аминов проводилась с использованием программного комплекса Mopac2000, с применением BFGS алгоритма, обычно применяемого для расчета молекулярных систем с межмолекулярными взаимодействиями.

В данной работе исследовалась димеризация ряда замещенных меламина с общей формулой $2C_nH_{2n+1}\text{-}C_3N_6H_4$ (n=6-16) на поверхности раздела фаз вода/пар.

Обсуждение результатов. ***Мономеры***

Изучение термодинамических параметров димеризации предшествовало иследование термодинамических характеристик соответствующих мономеров. Отметим, что в отличие от предыдущих работ этой серии [3-9], необходимости проведения конформационого анализа соответствующих мономеров нет. Это связано с тем, что нахождение дифильной молекулы на поверхности раздела фаз обеспечивает ее специфическую ориентацию: гидрофильная полярная триазинная группа переходит в жидкую фазу, а гидрофобные углеводородные радикалы выходят из воды и растягиваются. Таким образом, конфигурации углеводородных радикалов оказываются фиксированными, а плоская сопряженная система триазинной группы определяет единственную конформацию «головы» молекулы. Поэтому для исследуемых систем возможны следующие конформации, представленые на рис. 1, из которых первые четыре представляют собой конформации, обусловленные направлением связи у соответствующих амино-групп.

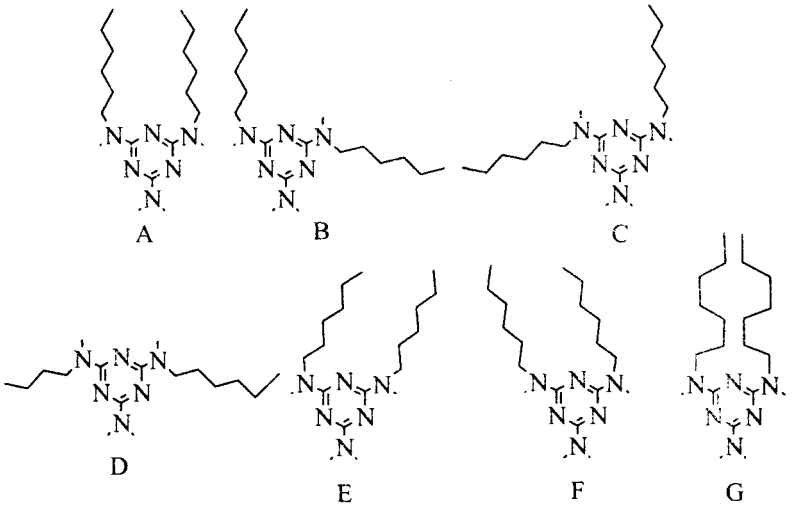


Рис. 1. Схематичное изображение возможных структур мономеров замещенных меламина

Оптимизация геометрии этих структур показывает, что двухмерные бесконечные кластеры на основе этих мономеров не могут быть получены. В этой связи были построены мономеры E, F, G, которые могут образовывать бесконечные двумерные кластеры. В мономерах E и F жирные радикалы находятся в

© Швед А.А., Высоцкий Ю.Б.

транс-конфигурации, а в мономере G – в цис-конфигурации. При этом возникает вопрос об относительной стабисьности выше указанных мономеров.

Результаты расчета (энтальпии образования, энтропии образования и энергии Гиббса образования) представлены в табл. 1, а оптимизированная геометрия некоторых из рассчитанных структур приведена на рис. 2.

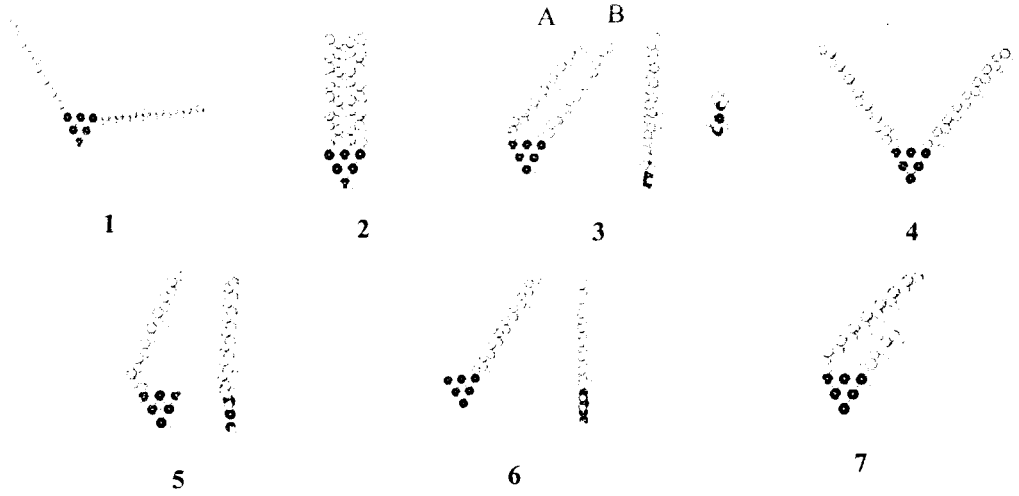


Рис. 2. Оптимизированые геометрические структуры некоторых мономеров алканзамещеных меламина

Таблица 1. Термодинамические параметры образования мономеров

n	Мономер 1	Мономер 2	Мономер 3	Мономер 4	Мономер 5	Мономер 6	Мономер 7
Стандартная энтальпия образования ΔH_{298}^0, кДж/моль							
6	-127.57	-119.72	-132.50	-127.54	-11.38	-11.18	-132.50
7	-172.88	-170.40	-185.27	-172.89	-34.08	-33.85	-162.25
8	-218.23	-216.16	-229.63	-218.24	-56.76	-56.49	-184.57
9	-263.59	-262.11	-276.74	-263.60	-79.44	-79.20	-207.54
10	-308.99	-304.54	-330.56	-308.96	-102.12	-101.85	-232.97
11	-354.32	-375.37	-377.80	-354.33	-124.81	-124.56	-255.88
12	-399.63	-397.38	-431.71	-399.69	-147.49	-147.21	-278.86
13	-445.05	-447.98	-478.96	-445.02	-170.18	-169.90	-301.60
14	-490.37	-494.29	-532.84	-490.43	-192.86	-192.60	-324.29
15	-535.82	-547.07	-580.12	-535.79	-215.54	-215.26	-346.97
Стандартная энтропия образования ΔS_{298}^0, кДж/моль							
6	-1877.46	-1939.86	-1906.22	-1876.58	-1268.88	-1258.12	-1905.99
7	-2085.28	-2173.18	-2140.43	-2084.91	-1372.50	-1362.36	-2039.38
8	-2295.56	-2409.49	-2336.00	-2293.14	-1475.92	-1466.86	-2139.47
9	-2503.57	-2617.71	-2553.80	-2501.62	-1580.38	-1570.83	-2243.04
10	-2713.44	-2833.99	-2773.18	-2712.61	-1683.94	-1673.40	-2367.19
11	-2920.80	-3085.93	-2998.34	-2919.34	-1787.02	-1779.09	-2471.05
12	-3133.42	-3265.79	-3202.59	-3131.38	-1890.47	-1880.48	-2573.40
13	-3340.94	-3486.47	-3433.09	-3338.06	-1993.69	-1986.14	-2676.94
14	-3548.68	-3708.02	-3646.41	-3545.48	-2098.91	-2089.91	-2777.40
15	-3752.53	-3936.17	-3865.61	-3760.14	-2197.79	-2192.32	-2877.33
Стандартная энергия Гиббса ΔG_{298}^0, кДж/моль							
6	431.91	458.36	435.55	431.68	366.74	363.74	435.48
7	448.53	477.21	452.58	448.42	374.92	372.13	445.49
8	465.84	501.87	466.50	465.11	383.07	380.63	452.99
9	482.47	517.97	484.29	481.88	391.51	388.91	460.88
10	499.61	539.98	495.85	499.39	399.69	396.82	472.45
11	516.08	544.24	515.71	515.64	407.72	405.61	480.49
12	534.13	575.83	522.66	533.46	415.87	413.17	488.02
13	550.55	590.99	544.10	549.72	423.94	421.97	496.13
14	567.13	610.70	553.79	566.13	432.62	430.19	503.38
15	582.43	625.90	571.83	584.73	439.40	438.05	510.47

Необходимо отметить, что оптимизированная геометрия мономера А (см. мономер 1 на рис.2) обладает разветвленными, а не параллельными углеводородными цепями, что приводит к невозможности построения кластеров большой размерности, эти обстоятельства не учитываются в работах [7-8]. Для мономеров А, В, С, D углеводородные цепи сильно удалены друг от друга и практически одинаково взаимодействуют с триазиновым кольцом, что приводит к одинаковости термодинамических характеристик этих мономеров. Для сравнения в табл. 1 приведены термодинамические параметры мономеров 1 и мономеров 4. Мономеры Е и F тоже обладают одинаковыми термодинамическими свойствами, так как являются энантиомерами.

В мономерах 2 и 3 представлены два вида внутримолекулярных водород-водородных взаимодействий; с «а»-типом (мономеры 3) и с «е»-типом (мономеры 2) Н-Н-взаимодействий углеводородных остовов. Данные типы взаимодействий схематично представлены на рис.3.



«а»-тип взаимодействия «е»-тип взаимодействия

Рис.3. Типы водород-водородных взаимодействий

Сравнивая результаты расчета энергии Гиббса, представленные в талб.1, видим, что мономер 2 характеризуется максимальными значениями энергии Гиббса образования, то есть эти мономеры являются наименее термодинамически выгодными. Более того, ранее на примере аминов [8] при рассмотрении димеров с «е»- типом межмолекулярного Н-Н взаимодействия было показано, что рост длины углеводородного радикала приводит не к уменьшении энергии Гиббса димеризации, а напротив, к ее возрастанию. Это свидетельствует о невозможности образования бесконечных кластеров на основе мономера 2. В этой связи в дальнейших исследованиях, не будут изучаться структуры с «е» – типом Н-Н взаимодействия.

Еще раз подчеркнем, что из схематических рисунков (см. например, рис.1), построенных на базе программного комплексов ChemOffice9.0, нельзя делать заключение о стерических особенностях тех или иных молекулярных структур. Так, мономеры А имеют не параллельную, а разветвленную конфигурацию жирных цепей (см. рис. 2 мономер 4). Что касается мономеров Е, F, то их оптимизированные структуры существенно отличаются от представленных на рис.2 мономеров 3. Это можно объяснить образованием водородных связей между двумя первыми группами CH_2 одного из двух углеводородных радикалов со свободными парами электронов первого и третьего атомов азота триазина, что обусловливает выход двух выше упомянутых атомов углерода радикала из плоскости молекулы, при этом образуется термодинамически выгодный «а»-тип внутримолекулярного водород-водородного взаимодействия.

Ранее на примере жирных спиртов [4,5], карбоновых кислот [10], тиоспиртов [8] и аминов [9] было показано, что для мономеров можно использовать аддитивную схему по числу – CH_2 – групп. При этом были получены линейные зависимости. Таким образом, для всех термодинамических параметров можно построить регрессионные зависимости от количества CH_2 – групп и числа внутримолекулярных Н-Н-взаимодействий. Параметры регресий и их стандарные отклонения приведены в табл.2, коэффициент кореляции для ΔН и S превосходный.

Таблиця 2. Корреляционное уравнение виду: $y = (a \pm \Delta a) + (b \pm \Delta b)n_{CH2} + (c \pm \Delta c)n_{H\text{-}H}$ мономеров производных меламину (количество точек 10), где n количество метиленовых цепей

Мономер	Характеристика	a ± Δa	b ± Δb	c ± Δc	S
1	ΔH^0_{298} (кДж/моль)	144.64±0.04	-45.36±0.01	0	0.039
	S^0_{298} (Дж/моль·К)	381.39±2.46	63.96±0.21	0	2.26
	ΔG^0_{298} (кДж/моль)	331.52±16.79	16.78±0.07	0	0.701
2	ΔH^0_{298} (кДж/моль)	160,84 ± 6,85	-41,83 ± 2,89	-5,21 ± 2,83	6,27
	S^0_{298} (Дж/моль·К)	382,71 ± 16,27	58,26 ±6,87	-6,78 ± 6,72	14,90
	ΔG^0_{298} (кДж/моль)	347,32 ± 4,38	22,02 ± 1,85	-3,19 ± 1,81	4,02
3	ΔH^0_{298} (кДж/моль)	156,56 ± 3,40	-46,53 ± 0,74	-7,58 ± 1,51	1,15
	S^0_{298} (Дж/моль·К)	655,07 ± 14,22	-194,71 ± 3,11	-31,72 ± 6,31	4,81
	ΔG^0_{298} (кДж/моль)	326,27 ± 3,69	19,86 ± 0,81	-20,75 ± 1,64	1,25

Продолжение таблицы 2

4	ΔH^0_{298} (кДж/моль)	144.65±0.22	-45.36±0.01	0	0.011
	S^0_{298} (Дж/моль·К)	388.29±1.91	63.34±0.17	0	1.75
	ΔG^0_{298} (кДж/моль)	329.46±0.56	16.97±0.04	0	0.521
5	ΔH^0_{298} (кДж/моль)	124,71 ± 0,01	-22,68 ± 0,01	0	0,00479
	S^0_{298} (Дж/моль·К)	359,62 ± 1,49	32,82 ± 0,14	0	1,25
	ΔG^0_{298} (кДж/моль)	318,07 ± 0,45	8,14 ± 0,04	0	0,372
6	ΔH^0_{298} (кДж/моль)	124,91 ±0,02	-22,68 ± 0,01	0	0,0156
	S^0_{298} (Дж/моль·К)	373,24 ± 0,96	32,37 ± 0,08	0	0,876
	ΔG^0_{298} (кДж/моль)	314,21 ± 0,28	8,28 ± 0,02	0	0,256
7	ΔH^0_{298} (кДж/моль)	151,78 ± 1,91	-23,12 ± 0,10	-6,75 ± 1,08	0,891
	S^0_{298} (Дж/моль·К)	389,05 ± 20,01	31,79 ± 1,03	-32,86 ± 11,28	9,31
	ΔG^0_{298} (кДж/моль)	336,38 ± 4,18	8,01 ± 0,21	3,04 ± 2,35	1,94

Для расчета термодинамических параметров образования мономеров с различными длинами радикалов А и В, кроме мономеров 1 и 4, представленных на рис.1, были рассчитаны термодинамические параметры мономеров с различным числом углеродных атомов в углеводородных радикалах (см. рис.2). Так, в мономере 5 отсутствует один из углеводородных радикал В (см. рис.2), а радикал А образует водородные связи между атомами водорода и азота. В мономере 6 отсутствует углеводородный радикал А, а радикал В не образует водородные связи между атомами водорода углеводородного радикала и атомами азота триазинового кольца. В мономере 7 длина углеводородного радикала В фиксирована шестью атомами углерода, тогда как в радикале А длина изменялась от 6 до 15 углеродных атомов.

В качестве иллюстраций для мономеров 1-4 с использованием регрессионных параметров, приведенных в табл. 2, были построены графики зависимости энтальпии, энтропии и энергии Гиббса образования от числа CH_2-групп (рис.4-6). Зависимости для мономеров 1 и 4 имеют линейный характер и практически совпадают, а для мономеров 2 и 3 – суперпозиция линейной и ступенчатой функции. Следует отметить, что для мономера 2 ступенчатый характер зависимости практически не проявляется.

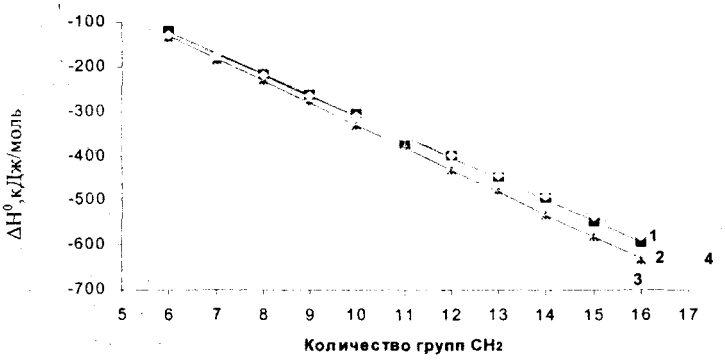


Рис. 4. Зависимость стандартной энтальпии образования мономеров от длины углеводородной цепи

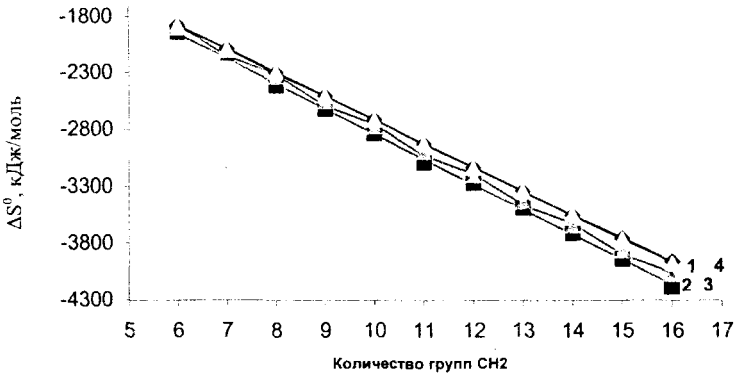


Рис. 5. Зависимость стандартной энтропии образования мономеров от длины углеводородной цепи

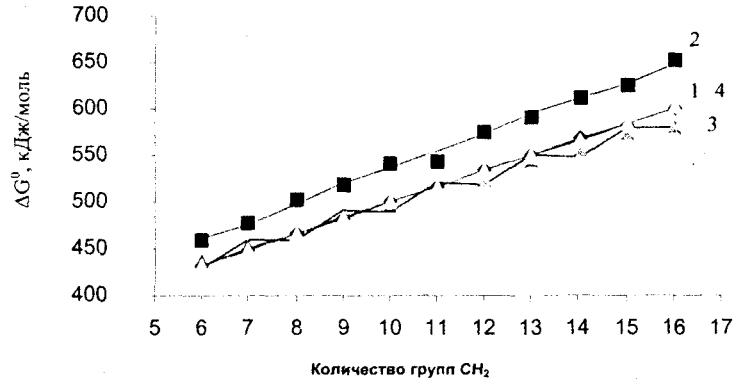


Рис. 6. Зависимость стандартной энергии Гиббса образования мономеров от длины углеводородной цепи

Из рис.8 видно, что при n >11 энергетически выгодно образование мономеров с внутримолекулярными связями «а»-типа, по сравнению с остальными мономерами.

Близость угловых коэффициентов в частных корреляциях (см. табл. 2) дают предпосылки для их объединения в общую корреляцию. В эту общую корреляцию не включен мономер 2 с «е»-типом как внутри-, так и межмолекулярных Н-Н взаимодействий, которые определяют невозможность образования кластеров на основе этого мономера.

Ниже приведены соответствующие объединенные корреляционные зависимости:

$$\Delta H_{298}^{0} = (22.72\pm0.02)n_1 + (9.51\pm0.16)n_2 + (145.54\pm0.55)n_3 + (150.56\pm0.45)n_4 + (125.25\pm0.31)n_5$$
(N=53; r = 0.9999; S = 0.821)

$$S_{298}^{0} = (31.0\pm0.19)n_1 + (-15.01\pm1.36)n_2 + (384.10\pm4.58)n_3 + (357.82\pm3.74)n_4 + (374.50\pm2.50)n_5$$
(N=53; r = 0.999; S = 6.79)

где n_1 – число CH_2- групп в мономере; n_2 – число Н – Н взаимодействий; n_3 – число, которое характеризует вклады триазина для мономеров 1,4; n_4 – число, которое характеризует вклады триазина для мономеров 3,7; n_5 – число, которое характеризует вклады триазина для мономеров 5,6.

Различие в коэффициентах при n_3, n_4 и n_5 обусловлено различием во взаимодействиях триазинового кольца с заместителями.

Представляет интерес определение энергетики переходного состояния между различными конформерами. В качестве иллюстрации было рассмотрено переходное состояние превращения мономеров 1 в 4. При этом был произведен конформационый анализ в режиме координат внутреннего вращения, изменяя величину торсионного угла –N-C-N-H молекулярного фрагмента в диапазоне от 0 до 360 градусов с шагом 5 градусов. Построена зависимость стандартной энтальпии образования конформаций от величины торсионного угла –N-C-N-H фрагмента. На пути минимальной энергии обнаружено два минимума и две седловые точки (они эквивалентны) рис.7.

Геометрия исходного, конечного и переходного состояний представлена на рис. 8. Там же приведены рассчитанные термодинамические параметры этих состояний.

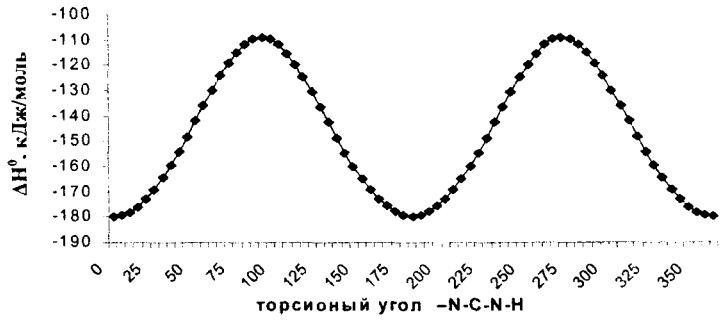
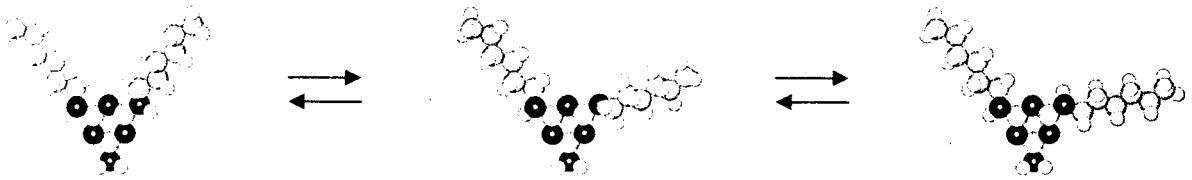


Рис.7. Зависимость изменения энтальпии образования мономеров от величины торсионного угла –N-C-N-H



Конформер 4	Перехідний стан	Конформер 1
ΔH^0_{298}= -128.58 (кДж/моль)	ΔH^0_{298}= -98.19 (кДж/моль)	ΔH^0_{298}= -128.69 (кДж/моль)
S^0_{298}= 545.11 (Дж/К моль)	S^0_{298}= 548.10 (Дж/К моль)	S^0_{298}= 547.19 (Дж/К моль)
ΔG^0_{298}= -290,99 (кДж/моль)	ΔG^0_{298}= -261,52 (кДж/моль)	ΔG^0_{298}= -291,75 (кДж/моль)

Рис.8. Термодинамические параметры переходного состояния

Из рис. 8 видно, что $\Delta\Delta G^{\#}$=-29,9±0,4 кДж/моль, что свидетельствует о существенной заторможенности вращения вокруг связи между азотом триазинного кольца и углеродом радикала.

Этот энергетический барьер не столь велик, чтобы полностью исключить переход мономеров, представленных на рис.1, друг в друга. В этой связи представляет интерес определить процентное содержание соответствующих мономеров. Состав системы может быть определен из стандартных энергий Гиббса каждого из сосуществующих мономеров [11]. Как было отмечено ранее и проиллюстрировано табл.1, из-за отсутствия внутримолекулярных H-H взаимодействий в мономерах A,B,C,D их термодинамические параметры, следовательно, и равновесные концентрации (x) одинаковы. С другой стороны, мономеры E и F является энантиомерами и их термодинамические параметры соответственно равны. Равновесные концентрации этих мономеров обозначим – y. Тогда из формулы, связывающей стандартные энергии Гиббса и равновесные концентрации, с учетом того, что энергии Гельмгольца и энергии Гиббса равны, например, для равновесия A↔E имеем:

$$y/x = \exp[-(\Delta G_E - \Delta G_A)/RT] = a_n \qquad (1)$$

Здесь n – число атомов углерода в радикалах от которого зависят соответствующие энергии Гиббса.

Второе уравнение для неизвестных x и y получаем из условия равенства сумы мольных долей мономеров единице.

$$4y+2x=1 \qquad (2)$$

Решая систему уравнений (1), (2), получим выражения для расчета концентраций x и y.

$$x = \frac{1}{4a_n + 2}; \qquad y = \frac{a_n}{4a_n + 2} \qquad (3)$$

Соответствующие значения концентраций мономеров, рассчитанные по формуле (3), приведены в табл.3.

Таблица 3. Процентного содержания мономеров в смеси

n	[A]=[B]=[C]=[D]=x	[E]=[F]=y
6	22.42 %	5.17 %
7	22.77 %	4.46 %
8	18.06 %	13.89 %
9	20.16 %	9.69 %
10	7.66 %	34.67 %
11	15.82 %	18.37 %
12	0.48 %	49.03 %
13	3.23 %	43.54 %
14	0.23 %	49.55 %
15	0.67 %	48.66 %
16	0.03 %	49.95 %

Таким образом, изучив структурные и термодинамические особенности представленных на рис.2 мономеров, пришли к заключению о том, что наиболее перспективным для дальнейшего изучения является мономер 3. Мономеры 1 и 4 не могут образовывать бесконечные структуры по двум причинам. Первая – пространственная геометрия мономеров позволяет образовывать только мицеллы формы шара или бесконечного цилиндра. Вторая заключается в том, что их образование менее выгодно с энергетической точки зрения (см. табл.1). Кроме того, при длине углеводородного радикала, равной 11-12 атомов углерода, происходит качественное изменение состава смеси (см. табл.3)

Димеры

Используя оптимизированную структуру мономера 3, были построены исходные структуры димеров. В качестве исходных структур выбрали три типа взаимной ориентации мономеров в димере (см. структуры 1-3 на рис9). Кроме того, в продолжение изучения структур замещенного меламина с одной углеводородной ветвью (см. структура 4 на рис.9).

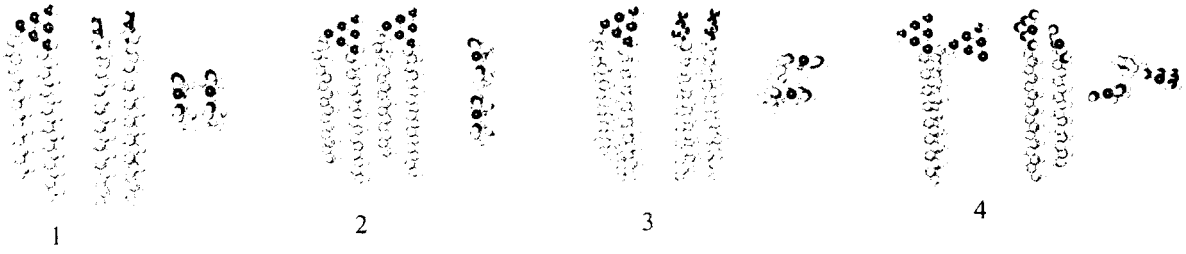


Рис. 9. Оптимизированые геометрические структуры некоторых мономеров алканзамещенных меламина

Для всех соединений, представленных на рис. 9, были рассчитаны термодинамические параметры их образования и димеризации. При вычислениях использовали следующие формулы: $\Delta H^{dim}_{298} = \Delta H^{0}_{298} - 2\cdot\Delta H^{mon}_{298}$ (энтальпия димеризации), $\Delta S^{dim}_{298} = S^{0}_{298} - 2\cdot S^{mon}_{298}$ (энтропия димеризации), $\Delta G^{dim}_{298} = \Delta H^{dim}_{298} - T\cdot\Delta S^{dim}_{298}$ (свободная энергия димеризации), где ΔH^{0}_{298} и S^{0}_{298} – энтальпия образования и абсолютная энтропия соответствующих димеров, а ΔH^{mon}_{298} и S^{mon}_{298}– образования и абсолютная энтропия соответствующих мономеров. Полученные значения приведены в табл.4.

Таблица 4. Стандартные термодинамические характеристики образования и димеризации димеров производных меламина (ΔH^{0}_{298}, ΔG^{dim}_{298} в кДж/моль, а S^{0}_{298} и ΔS^{dim}_{298} – в Дж/моль·К)

n	ΔH^{0}_{298}	ΔH^{dim}_{298}	S^{0}_{298}	ΔS^{dim}_{298}	ΔG^{dim}_{298}
Димер 1					
6	-314.01	-49.00	1221.28	-253.48	26.54
7	-425.60	-55.06	1307.99	-243.38	17.47
8	-531.64	-72.39	1412.45	-292.84	14.88
9	-635.92	-82.43	1514.22	-300.50	7.12
10	-754.55	-93.44	1588.24	-332.75	5.72
11	-858.55	-102.95	1708.47	-307.25	-11.39
12	-977.70	-114.28	1774.64	-377.61	-1.75
13	-1081.79	-123.88	1890.54	-345.77	-20.84
14	-1200.87	-135.19	1960.35	-394.35	-17.67
15	-1305.02	-144.79	2080.33	-381.02	-31.24
Димер 2					
6	-280.91	-15.90	1319.05	-155.69	30.49
8	-489.64	-30.39	1520.65	-184.62	24.62
9	-592.01	-38.52	1613.11	-201.60	21.55
10	-701.99	-40.87	1717.50	-203.49	19.76
12	-914.17	-50.75	1922.77	-229.48	17.62
13	-1016.53	-58.60	1968.32	-267.98	21.25
14	-1124.94	-59.24	2081.82	-272.87	22.07
15	-1228.13	-67.90	2167.79	-293.55	19.57
16	-1337.42	-69.48	2230.84	-356.82	36.84
Димер 3					
6	-321.53	-56.52	1171.96	-302.78	33.70
7	-394.50	-23.96	1259.22	-292.15	63.09
8	-546.91	-87.66	1336.66	-368.62	22.18

Продолжение таблицы 4.

9	-651.96	-98.47	1433.11	-381.61	15.24
10	-774.15	-113.03	1502.84	-418.15	11.57
11	-878.69	-123.10	1600.67	-415.04	0.58
12	-1001.31	-137.89	1669.11	-483.14	6.07
13	-1105.82	-147.90	1770.03	-466.27	-8.95
14	-1228.41	-162.72	1838.47	-516.22	-8.88
15	-1332.99	-172.75	1937.29	-524.05	-16.58
Димер 4					
6	-46.26	-23.71	974.57	-150.51	21.15
7	-92.87	-24.94	1038.87	-150.87	20.02
8	-147.16	-33.91	1080.85	-173.49	17.79
9	-193.91	-35.27	1140.54	-177.88	17.74
10	-248.19	-44.22	1181.97	-202.85	16.23
11	-294.93	-45.56	1240.45	-208.12	16.46
12	-349.24	-54.54	1283.33	-232.91	14.87
13	-396.04	-55.96	1345.41	-234.48	13.91
14	-450.33	-64.87	1387.77	-255.65	11.31
15	-497.17	-66.37	1445.73	-268.93	13.77
16	-551.39	-75.48	1492.92	-291.80	11.47

Как и ранее [4-10], были построены корреляционные зависимости термодинамических параметров димеризации от числа межмолекулярных Н-Н взаимодействий. Параметры этих корреляций представлены в табл.5.

Таблица 5. Корреляционное уравнение вида: $y = (a \pm \Delta a) + (b \pm \Delta b)n_{H\text{-}H}$ димеров производных меламина (количество точек 11), где n количество метиленовых цепей

Димер	Характеристика	a ± Δa	b ± Δb	S
1	ΔH^{dim}_{298} (кДж/моль)	-5.36±1.92	-10.82±0.21	1.95
	ΔS^{dim}_{298}(Дж/моль·К)	-185.09±19.77	-16.21±2.00	20.0
	ΔG^{dim}_{298}(кДж/моль)	49.79±4.90	-5.99±0.55	4.97
2	ΔH^{dim}_{298} (кДж/моль)	-8.48±1.41	-10.15±0.33	1.66
	ΔS^{dim}_{298} (Дж/моль·К)	-109.30±17.72	-33.78±4.10	20.90
	ΔG^{dim}_{298}(кДж/моль)	24.09±5.57	-0.08±1.31	6.57
3	ΔH^{dim}_{298}(кДж/моль)	7.60±8.23	-8.85±0.54	6.41
	ΔS^{dim}_{298} (Дж/моль·К)	-175.19±11.85	-17.42±0.78	9.23
	ΔG^{dim}_{298}(кДж/моль)	59.80±7.72	-3.66±0.51	6.02
4	ΔH^{dim}_{298}(кДж/моль)	-3.76±0.62	-10.28±0.14	0.73
	ΔS^{dim}_{298} (Дж/моль·К)	-92.48±3.21	-26.30±0.71	3.73
	ΔG^{dim}_{298}(кДж/моль)	23.79±0.67	-1.85±0.15	0.78

Как видно из табл.5, угловые коэффициенты корреляций достаточно близки, что позволяет объединить эти корреляции:

$$\Delta H^{dim}_{298}=(9{,}37\pm0{,}20)n_1+(-19{,}36\pm2{,}17)n_2+(-11{,}24\pm1{,}33)n_3+$$
$$+(20{,}47\pm3{,}57)n_4+(-7{,}80\pm1{,}39)n_5;$$
$$(N=42;\ r=0{,}981;\ S=6{,}77);$$

$$\Delta S^{dim}_{298}=(-20{,}72\pm1{,}36)n_1+(-151{,}98\pm14{,}63)n_2+(-145{,}74\pm8{,}98)n_3+$$
$$+(-120{,}52\pm24{,}05)n_4+(-126{,}40\pm9{,}37)n_5;$$
$$(N=42;\ r=0.973;\ S=20{,}67).$$

где n_1– число Н – Н взаимодействий; n_2, n_3, n_4, n_5 – числа, которые характеризуют вклады триазинов для димеров 1,2,3,4 соответственно.

Используя полученные корреляции, были построены зависимости энтропии, энтальпии димеризации от длины углеводородного радикала.

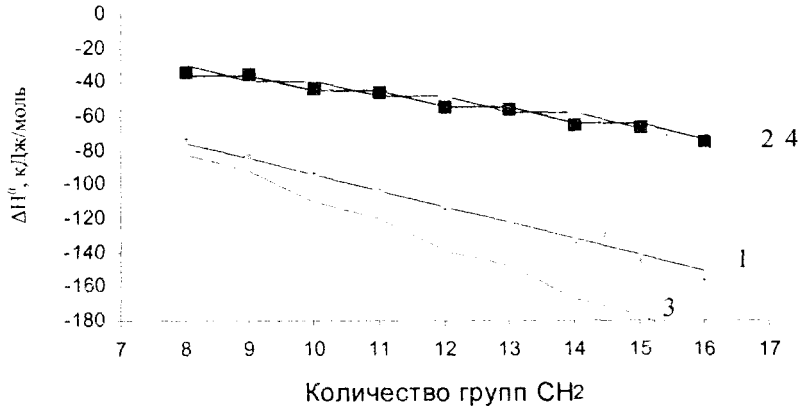


Рис. 10. Зависимость стандартной энтальпии образования димеров от длины углеводородной цепи

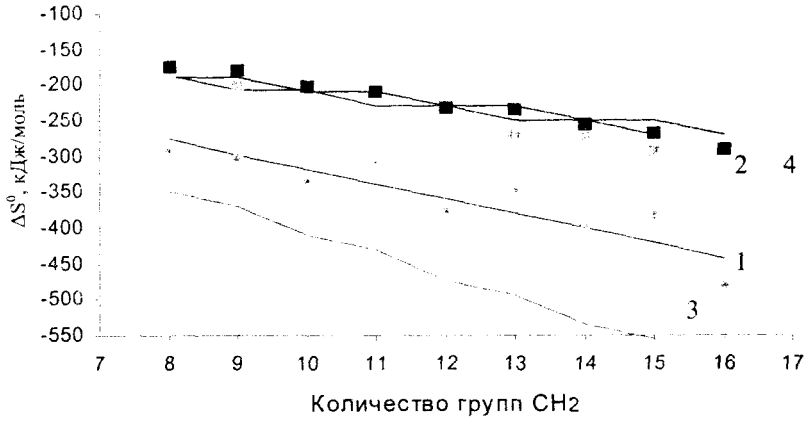


Рис. 11. Зависимость стандартной энтальпии образования димеров от длины углеводородной цепи

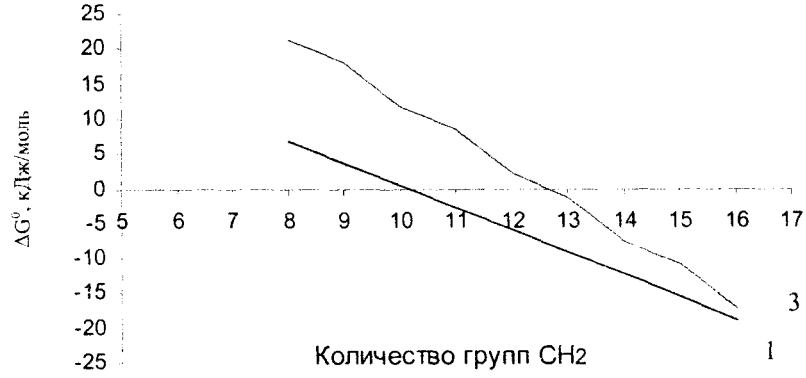


Рис. 12. Зависимость стандартной энергии Гиббса образования димеров от длины углеводородной цепи

Зависимости имеют ступенчатый характер. Сплошными линиями обозначены корреляционные зависимости, а точками – прямой расчет. Из графиков видно, что точки хорошо лежат на соответствующих кривых.

Расчеты показали, что при длине углеводородной цепи меньше двенадцати атомов углерода димеризация самопроизвольно не проходит. Это отвечает экспериментальным данным [2].

Выводы

Таким образом, в данной работе дана квантово-химическая трактовка димеризации замещенных меламинов на поверхности раздела фаз вода/пар. В рамках полуэмпирического метода PM3 были рассчитаны термодинамические параметры данного процесса. Зависимости энтальпии, энтропии и энергии Гиббса от длины угле-

водородных радикалов для мономеров1 и 4 – линейны, а для мономеров 2 и 3 – ступенчаты, что связано с наличием или отсутствием внутримолекулярных Н-Н взаимодействий; коэффициенты соответствующих корреляций превышают 0,999. Аналогичные зависимости для димеров 2 и 4 имеют ступенчатый характер, для димера 1 – линейный, а для димера 3 – суперпозиционный (сумма линейной и ступенчатой функций), что, в свою очередь, связано с наличием для всех структур межмолекулярных Н-Н взаимодействий. Рассчитан процентный состав смеси мономеров, из которого видно, что при переходе рубежа в 11-12 атомов углерода в цепи, состав смеси меняется от преобладания мономеров без внутримолекулярных взаимодействий к преобладания мономеров, содержащих такие взаимодействия.

Самопроизвольная димеризация замещенных меламина начинается при длине радикала равного 10-ти углеродных атомов. Кроме того, было показано, что энергетически выгодным расположением в пространстве мономеров в димере являются структуры типа 1 и 3 (см. рис. 11). В дальнейшем полученные данные будут использованы при изучении термодинамических закономерностей процесса кластеризации замещенных меламинов.

РЕЗЮМЕ

У рамках напівемпіричного методу РМ3 були розраховані термодинамічні параметри утворення мономерів заміщених меламіну і відсотковий вміст їх суміші. На основі термодинамічно вигідного мономеру були побудовані структури димерів. Для отриманих структур були розраховані термодинамічні параметри (ентальпії, ентропії та енергії Гібсса) димерізації.

SUMMARY

In frameworks semiempirical method PM3 the thermodynamic parameters of formation monomers replaced melamine were designed and their percentage of their mix is designed. On a basis thermodynamic favourable a monomeasure the structures dimers were constructed. For the received structures the thermodynamic parameters enthalpy, entropy and energy of the Gibbs) were calculated.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kaplan I.G. Intermolecular interactions. Physical picture, computation methods and model potentials, Wiby, 206, P.380-2006.
2. Volhardt D. // Adv Colloid Interfase Sce 2005; 116:63-80.
3. Швед О.О., Тицький Г.Б. Висоцький Ю.Б. Перехідний стан ізомерізації 2С6Н13-меланіну // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: хімія і хімічна технологія. 2007, в.119(9), с. 187.
4. Vysotsky Yu. B., Bryantsev V. S., Fainerman V. B. Quantum Chemical Analysis of the Thermodynamics of 2D Cluster Formation of Odd n-Alcohols at the Air/Water Interface // J. Phys. Chem. B, 2002. – V. 106. – P. 11285-11294.
5. Vysotsky Yu. B., Bryantsev V.S., Fainerman V.B., Vollhardt D., Miller R. Quantum chemical semiempirical approach to the thermodynamic characteristics of oligomers and large aggregates of alcohols at the water/air interface // Colloids and Surfaces, A: Physicochemical and Engineering Aspects 209 (2002). – P. 1–14.
6. Высоцкий Ю.Б., Брянцев В.С., Болдырева Ф.Л. Конформационній анализ мономеров и димеров фторспиртов $C_nF_{2n+1}CH_2CH_2OH$ в рамках полуэмпирического метода РМ3 // Наукові праці Донецького національного технічного університету.Серія: хімія і хімічна технологія. 2006, в.108, с. 34-46.
7. Vysotsky Yu. B., Bryantsev V.S., Boldyreva F.L., Fainerman V.B., and Vollhardt D. Quantum Chemical Semiempirical Approach to the Structural and Thermodynamic Characteristics of Fluoroalkanols at the Air/Water Interface // J. Phys. Chem. B, 2005. – V. 109. – P. 454-462.
8. Vysotsky Yu. B., Belyaeva E. A., Fainerman V.B., Vollhardt D., and Miller R. Quantum Chemical Analysis of the Thermodynamics of 2D Cluster Formation of *n*-thioalcohols at the Air/Water Interface // in print.
9. Vysotsky Yu. B., Belyaeva E. A., Fainerman V. B., Vollhardt D., and Miller R. Quantum Chemical Analysis of the Thermodynamics of 2D Cluster Formation of Single Chain Fatty Amines at the Air/Water Interface // in print.
10. Vysotsky Yu. B., Muratov D. V., Boldyreva F. L., Fainerman V.B., Vollhardt D. and Miller R. Quantum Chemical Analysis of the Thermodynamics of 2D Cluster Formation of *n*-Carboxy Acids at the Air/Water Interface // J. Phys. Chem. B, 2006. – V. 110. – P. 4717-4730.
11. Стромберг А.Г. Физическа химия: Учеб. для хим. спец. вузов / 5-е изд. , испр. – М.: Высш. шк., 2003. – 527 с.

Надійшла до редакції 04.04.2007 р.

УДК 541.1÷662.66

ОЦЕНКА ЛИОФОБНЫХ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ ИСКОПАЕМЫХ УГЛЕЙ

А.В.Бутюгин

В работах [1-4] отмечалось, что окисление углей сопровождается некоторым увеличением гидрофобности и лиофобности углей. Было также показано, что процесс диспергирования углей на воздухе сопровождается окислением их поверхности. Выяснение влияния низкотемпературного окисления и диспергирования углей на соотношение полярных и лиофобных (гидрофобных) свойств их поверхности представляет определенный научный и практический (флотация, пылеподавление, водоугольные суспензии) интерес. Различные методы оценки свойств поверхности [1] не всегда дают однозначный результат.

Целью настоящей работы является оценка лиофобных (гидрофобных) свойств поверхности диспергированных ископаемых углей с использованием модифицированных методов исследований.

Оценку лиофобных свойств поверхности ископаемых углей осуществляли с помощью метода капиллярного поднятия жидкостей [5] и электроемкостного метода [6], которые ранее не применялись для оценки свойств поверхности ископаемых углей.

В методе капиллярного поднятия за основу оценки принято капиллярное поднятие жидкостей в слое порошка (диспергированного материала). Высота капиллярного поднятия функционально связана с краевым углом смачивания, который является показателем гидрофильно-гидрофобных свойств поверхности. Оценки лиофобных свойств поверхности углей проводили по модифицированной методике. Автор методики оценивал гидрофобность поверхности частиц дисперсной фазы по капиллярному поднятию воды и неполярных органических жидкостей. Данную методику пришлось модифицировать таким образом, что вместо воды, которая очень плохо смачивает диспергированные угли, использовали полярные органические жидкости. Это позволило оценивать в целом лиофильно-лиофобные свойства поверхности углей.

Опыты были проведены на углях ранней стадии метаморфизма (марка Д) и средней стадии метаморфизма (марка К). окисление углей проводили в динамических условиях кислородом воздуха по описанной выше методике (1). В стеклянные трубочки, нижний конец которых закрыт бумажным фильтром, помещали диспергированный уголь и уплотняли до одинаковой высоты с помощью вибрации. Затем трубочки опускали в сосуд с жидкостью и определяли скорость капиллярного поднятия жидкости (или высоту поднятия) в течение 60 сек. Количество параллельных опытов – 12.

Результаты опытов по капиллярному поднятию органических жидкостей представлены в таблице 1.

Таблица 1. Высота капиллярного поднятия органических жидкостей в дисперсиях углей Д и К (дисперсность угля Д = $2\text{-}3\cdot10^{-4}$ м; дисперсность угля К = $1\text{-}2\cdot10^{-4}$ м)

Жидкость	σ, 10^{-3} н/м при 20^0С	Высота капиллярного поднятия 10^{-2}м за 60 сек			
		Уголь Д (грамот)		Уголь К (ш. К.Маркса)	
		Исходный	Окисленный	Исходный	Окисленный
Гексан	18,5	3,9	3,2	5,5	4,4
Гептан	20,9	3,7	2,8	5,0	4,2
Октан	21,8	3,3	2,4	4,3	3,6
Бензол	28,9	3,0	1,9	3,9	3,0
Ацетон	23,7	3,3	3,0	4,7	3,9
1,4-Диоксан	33,0	2,2	1,9	2,8	2,6
Пропанол	22,9	1,9	1,4	2,1	1,6
изо-Пропанол	21,2	1,4	1,1	1,6	1,3

Из таблицы 1 видно, что общая закономерность для обоих углей заключается в уменьшении высоты капиллярного поднятия жидкостей с ростом поверхностного натяжения (для неполярных жидкостей), с ростом сил взаимодействия (для полярных жидкостей) и при окислении углей. Для неполярных жидкостей и ацетона наблюдается корреляция высоты капиллярного поднятия и поверхностного натяжения на исходном угле Д. На окисленном угле Д такая корреляция сохраняется для неполярных жидкостей (ацетон немного смещается вверх). На угле К (исходном и окисленном) корреляция между высотой капиллярного поднятии и изменением поверхностного натяжения наблюдается только в ряду неполярных жидкостей. Можно отметить, что неполярные органические жидкости более чувствительны к окислению поверхности углей: у них больше абсолютная разница высот капиллярного поднятия. При этом и отно-

© Бутюгин А.В.

сительная разница высот поднятия в ряду гексан – бензол растет с 18 до 37%., в то время как в ряду диоксан-изопропанол эта разница не превышает 27%. Этот факт указывает на следующее:

1. на возрастание полярных участков (по капиллярному поднятию неполярных жидкостей);
2. на уменьшение взаимодействия между поверхностью угля и органическими жидкостями в результате хемоадсорбционной дезактивации поверхности.

Показатель лиофобности рассчитывали по формуле [5]:

$$S = h_н - h_п \mid h_н, \text{ где} \qquad (1)$$

$h_н$ – высота капиллярного поднятии неполярной жидкости;

$h_п$ – высота капиллярного поднятия полярной жидкости.

Получаемый по формуле (1) показатель можно назвать показателем лиофобности, хотя он реально показывает долю смачивания неполярной жидкости при сравнительном смачивании конкретного угля неполярной и полярной органической жидкостью. В этом случае этот показатель лиофобности может служить и для оценки полярности (изменения полярности) поверхности углей. Для наиболее корректного расчета показателя лиофобности брали данные для пары жидкостей с близкими температурами кипения (например, гептан и пропанол, бензол-изопропанол), чтобы нивелировать влияние летучести. Вязкости полярных и неполярных жидкостей отличаются слишком сильно. Результаты расчетов по формуле (1) показателей лиофобности исследуемых углей для различных пар жидкостей приведены в таблице 2.

Таблица 2. Показатели лиофобности поверхности углей Д и К

Жидкости	Показатель лиофобности, S			
	Уголь Д		Уголь К	
	Исходный	Окисленный	Исходный	Окисленный
Гексан-ацетон	0,15	0,06	0,15	0,11
Гексан-диоксан	0,44	0,41	0,49	0,41
Гексан-пропанол	0,51	0,56	0,62	0,64
Гексан-изопропанол	0,64	0,66	0,71	0,70
Гептан-ацетон	0,11	-0,07	0,06	0,07
Гептан -диоксан	0,41	0,32	0,44	0,38
Гептан-пропанол	**0,49**	**0,50**	**0,58**	**0,62**
Гептан-изопропанол	0,62	0,69	0,68	0,69
Октан-ацетон	0,00	-0,25	0,06	0,07
Октан-диоксан	0,33	0,21	0,35	0,28
Октан-пропанол	0,42	0,25	0,47	0,56
Октан-изопропанол	0,58	0,54	0,63	0,64
Бензол-ацетон	-0,10	-0.58	-0,21	-0,30
Бензол-диоксан	0,27	0,00	0,28	0,13
Бензол-пропанол	0,37	0,26	0,46	0,47
Бензол-изопропанол	**0,53**	**0,42**	**0,59**	**0,57**

Анализ данных таблицы 2 позволяет сделать следующие выводы:

1. показатели лиофобности исходного и окисленного угля К однозначно выше практически для всех пар органических жидкостей, чем для исходного и окисленного угля Д; эти данные подтверждает низкую энергетику поверхности угля К;
2. для пар неполярная жидкость – ацетон можно отметить уменьшение показателей лиофобности на окисленном угле Д; для окисленного угля К такой закономерности не наблюдается;
3. для обеих пар с близкими температурой кипения и поверхностным натяжением (гептан-пропанол и бензол-изопропанол) показатели лиофобности углей Д и К наиболее близки, что подтверждает корректность оценки.

Для оценки гидрофобных свойств поверхности диспергированных ископаемых углей был испытан новый электроемкостной метод. Электроемкостной метод оценки гидрофобности дисперсных материалов был испытан его авторами на различных сажах с наполнителями [6]. По данным авторов метода, увеличение доли гидрофобной составляющей (сажи) в смеси приводит к уменьшению электроемкости диафрагмы. Метод оценки гидрофобности основан на измерении электроемкости ячейки с порошковой

диафрагмой, формируемой в водных растворах электролитов. Исследуемые угли замачивали в 0,1 н растворе хлористого калия (KCl) для исключения влияния поверхностной проводимости на результаты измерений. Затем помещали в пластмассовую ячейку и уплотняли статической нагрузкой 10^{-5} н/м^2. Угольную диафрагму прикрывали перфорированной пластиной из пластмассы и фильтром, затем ячейка закрывалась специальными насадками, в которые впаяны хлорсеребряные электроды. Эти насадки заполняли 0,1 н раствором КС1. Емкость ячейки определяли с помощью универсального измерителя Е-7-10. В связи с плохой смачиваемостью некоторых углей (особенно коксовых) 0,1 н раствором КС1, измерения проводили сразу после заполнения, а затем через 24, 48 и 72 часа.

Целью данной части работы было установление зависимости электроемкости угольных диафрагм от степени метаморфизма и дисперсности, что позволило бы оценить гидрофобность дисперсий углей метаморфического ряда. Исследовался ряд углей – от бурого до антрацита различных месторождений (Канско-Ачинского, Кузнецкого и Донецкого бассейнов). Время измерения варьировалось от 1 часа до 72 часов, чтобы оценить влияние времени смачивания.

В таблице 3 представлены результаты опытов по измерению электроемкости диафрагм углей.

Таблица 3. Кинетика изменения электроемкости диафрагм из углей разной степени метамолрфизма

Марка угля. Дисперсность, $\cdot 10^{-4}$ м	A^c, % общ.	Электроемкость, $\cdot 10^{-9}$ F			
		Время измерения после формирования диафрагмы, час			
		1	24	48	72
$Б_{К\text{-}А}$, 1-2	-	2,17	-	2,42	-
2-3		1,42	1,48	1,51	1,15
$Д_{К,с.1}$, 1-2	6,8	1,67	2,01	2,09	1,99
2-3		0,96	1,38	1,33	0,82
$Д_{К,с.2}$, 1-2	7,2	1,98	1,79	1,78	1,70
2-3		1,09	1,36	1,22	0,74
$Д_{Д.труд}$, 1-2	4,2	2,08	2,11	1,95	-
2-3		1,41	1,95	1,52	0,92
$Г_{Д.окт}$, 1-2	6,7	-	2,17	2,32	2,44
2-3		1,35	1,36	1,13	0,72
$К_{Д.праск}$, 1-2	5,7	2,42	-	2,15	-
2-3		0,96	1,18	1,23	0,64
$К_{Д.лив.}$, 1-2	4,9	1,97	-	2,25	-
2-3		0,91	1,34	1,14	0,83
$А_{Д.фом.}$, 1-2	1,2	-	5,98	9,15	9,51
2-3		7,73	10,71	10,27	9,03
$А^{ок}_{Д.фом.}$, 2-3	1,4	13,51	13,18	-	11,53

Анализ данных таблицы позволяет сделать следующие выводы:

1. для всех углей, кроме антрацита, наблюдаются меньшие значения электроемкости, а, следовательно, и большая доля гидрофобности для частиц дисперсностью 2-3$\cdot 10^{-4}$ м;
2. более высокие значения электроемкости на этих же углях, но с дисперсностью 1-2$\cdot 10^{-4}$ м может быть объяснено большей окисленностью этих фракций и/или большей зольностью, так как известно, что зольность увеличивается в более мелких классах;
3. диафрагмы углей марки К (дисперсностью 2-3$\cdot 10^{-4}$ м) имеют наименьшую электроемкость и наибольшую долю гидрофобности;
4. для всех углей и всех дисперсностей наблюдается изменение электроемкости во времени с максимумом через 24 часа. Такая зависимость может быть связана с образованием вторичных коагуляционных структур под влиянием 0,1 н раствора KCl, в котором замачивали угли и проводили измерения. Это предположение вполне согласуется с данными работы [7], в которой показано влияние солей на гидрофобизацию углей.

Можно отметить, что антрацит нарушает зависимость электроемкости от дисперсности и имеет значительно более высокие значения электроемкости. При этом наибольшую электроемкость имеет более крупная фракция. Высокие значения электроемкости антрацита могут быть связаны с его полупроводниковыми свойствами. Хотя в работах [8,9] отрицается хемосорбция кислорода на антраците при низкотемпературном окислении и функциональные кислородсодержащие группы химически не обнаружены, в наших опытах на примере антрацита четко видно влияние окисления на электроемкость диафрагмы. Одной из причин трудности определения функциональных групп на антраците, возможно, является

уменьшение общей реакционной способности углей с ростом степени метаморфизма. Последние данные Кучеренко В.А. свидетельствуют о том, что реакционная способность, например, хинонов в каменных углях непрерывно уменьшается и это способствует сохранению в углях наименее реакционоспособных хинонов и даже увеличению их доли в общем кислороде [10].

Таким образом, проведенные опыты показали, что метод капиллярного поднятия и электроемкостной метод может быть использован для оценки лиофильно-лиофобных и гидрофобных свойств поверхности диспергированных ископаемых углей.

РЕЗЮМЕ

Засобом капілярного підняття оцінено ліофільно-ліофобні властивості вихідних та окислюваних вуглей. Електроемкостним засобом проведена оцінка гидрофобних властивостей вугілля. Показано залежність капілярного підняття органічних рідин та електроемкості вугільних діафрагм від дисперсності та окислюванності вуглей.

SUMMARY

The lyophilic and lyophobic properties of the initial and oxidized coals were estimated by method of capillary lift. Estimate of hydrophobic properties of the coals was spended by electric capacitance method. It was shown, that capillary lift of the organic liquids and electric capacitance of the coal diaphragms depends on dispersity and oxidized coals.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бутюгин А.В. Влияние окисления и адсорбции на смачиваемость природных углей // Вісник Донецького університету. Серія А. Природничі науки. – 2006, вып. 2. – С. 210-217.
2. Сорокин А.Ф., Комарова Э.В., Лимонцева Т.Д. О влиянии гидрофобности угольных шламов на их фильтруемость / Теория и практика подготовки и коксования углей, вып. 6. – М.: Металлургия, 1977. – С.13-16.
3. Власова Н.С., Классен В.И., Кушнерева В.Г. Регулирование флотируемости частиц угля изменением количества кислородсодержащих групп на их поверхности / Тр. Ин-та обогащения тв. горюч. ископаемых Мин. угольн. пром-ти СССР. – 1872. – Т. 1. – С.9-18.
4. Marchioni X.L. A preliminary assesment of coal slurry pH and flotation as parameters of weathering in Western Canadian coals // CIM Bull. – june 1981. – 74. – № 830. – P. 52-54 (англ.).
5. Игнатенко А.П. Методика оценки гидрофобности поверхности частиц дисперсной фазы // Журн. прикл. химии. – 1979. – Т. 52. – № 4. – С. 831-833.
6. Гладских Ю.П., Иванищенко О.И., Паус К.Ф. Емкостной метод оценки степени гидрофобности порошков / Сб. трудов Белгород. технолог. ин-та строит. материалов, вып. 15. – М.: МИСИ, 1975. – С 28-33.
7. Классен В.И., Ковалев К.П. К механизму действия неорганических электролитов при флотации природных гидрофобных минералов // Докл. АН СССР. – 1959. – Т. 129. – № 6. – С.1356-1358.
8. Саранчук В.И., Галушко Л.Я., Матвеев Н.Г. Микрокалориметрические исследования процесса низкотемпературного окисления угля и углесодержащих пород // Химия твердого топлива. – 1982. – № 1. – С.103-109.
9. Саркар С. О кислородсодержащих функциональных группах, определяемых в каменных углях // Химия и технология топлив и масел. – 1960. – № 14. – С. 31-36.
10. Кучеренко В.А. и др. О некоторых особенностях изменения содержания карбонильных групп углей в процессе метаморфизма // Химия твердого топлива. – 1983. – № 1. – С.9-12.

Надійшла до редакції 02.04.2007 р.

УДК 543

ВИДІЛЕННЯ ТА ВИЗНАЧЕННЯ СРІБЛА У ВІДХОДАХ ЕЛЕКТРОННОЇ ПРОМИСЛОВОСТІ

І.О.Шевчук, О.В.Добридін, Н.П.Дмитрук, І.А.Горбик

Для визначення основної маси срібла використовують титриметричний метод за ДСТУ [1]. Срібло виділяють у вигляді хлориду на паперовому фільтрі, який потім обробляють сумішшю сірчаної та азотної кислот при нагріванні. Тривалість аналізу складає близько трьох діб.

При виділенні срібла у вигляді хлориду треба враховувати вплив інших металів: Hg(I), Cu(I), Tl(I), Pb(II) і Pd(II). При нагріванні з азотною кислотою хлориди ртуті й міді переходять у розчин, а для розчинення хлориду талію необхідно кип'ятити розчин із сумішшю соляної та азотної кислот [2]. Паладій можна видалити дворазовим переосадженням хлоридів із аміачного середовища [2]. Разом із сріблом осаджується також хлорид Pb (II), який може знаходитись у відходах у вигляді сплавів. Описаний в літературі [2] гравіметричний метод визначення срібла з виділенням його хлориду на скляному фільтрі стосовно відходів електронної промисловості метрологічно не обґрунтований.

Метою даної роботи було вивчення оптимальних умов гравіметричного визначення срібла у відходах електронної промисловості, а також вивчення і усунення впливу свинцю при визначенні срібла.

Для оптимізіції умов гравіметричного визначення срібла проводили дослідження на модельних і реальних розчинах нітрату срібла.

Методика. Аналізований розчин підкислювали концентрованою азотною кислотою (1,0 $см^3$), нагрівали до 70-80°С та додавали до нього по краплях, при постійному перемішуванні, 10,0 $см^3$ соляної кислоти (2 моль/$дм^3$). Нагрівали розчин до кипіння і кип'ятили декілька хвилин до коагуляції осаду хлориду срібла. Давали осаду постояти 0,5 години у темному місці, перевіряли повноту осадження і фільтрували через зважений скляний фільтр. Осад промивали спочатку азотною кислотою (0,01моль/$дм^3$) для видалення з нього сорбованих хлорид-іонів, потім дистильованою водою. Сушили при 110 – 120°С до постійної маси та зважували. Фактор перерахунку хлориду срібла на срібло – 0,7526.

В роботі використовували скляні фільтри (фільтри Шотта) з порами 16, 40 та 160. Попередніми дослідами встановлено, що фільтри з порами 40 та 160 не затримують осад хлориду срібла повністю. Нами було обрано скляний фільтр з кількістю пор 16, досліджено умови осадження та коагуляції хлориду срібла.

Метрологічна обробка даних проводилась за [3, 4] і наведена у табл. 1.

Паралельно проводили титриметричне визначення срібла. Дані аналізу представлені в табл.2.

Таблиця 1. Метрологічні характеристики гравіметричного визначення срібла

Характеристика	Значення
x_i, мг	74,36; 74,73; 74,81; 75,49; 75,49; 75,86
$x_{ср}$, мг	75,12
n	6
V, мг	0,33
S, мг	0,57
S_r	0,0077
$(x_{ср} \pm \Delta x_{ср})$, мг	75,12 ± 0,57

З табл. 1 та 2 видно, що за двома незалежними методиками результати визначення срібла співпали в межах похибки. Як і можна було очікувати, похибка гравіметричного методу (0,0077) менша за похибку титриметричного (0,012).

Було вивчено вплив свинцю на гравіметричне визначення срібла.

Згідно з літературними даними свинець заважає визначенню срібла, тому що також осаджується у вигляді хлориду. ДР($PbCl_2$) = $1{,}6 \cdot 10^{-5}$ значно більший, ніж ДР(AgCl) = $1{,}78 \cdot 10^{-10}$.

Розчинність у воді хлориду свинцю буде підвищуватись із підвищенням температури (табл. 3).

© Шевчук І.О., Добридін О.В., Дмитрук Н.П., Горбик І.А.

Таблиця 2. Метрологічні характеристики титриметричного визначення срібла

Характеристика	Значення
x_i, мг	74,13; 73,07; 74,13; 75,19; 74,66; 75,72
$x_{ср}$, мг	74,48
n	6
V, мг	0,86
S, мг	0,93
S_r	0,012
$(x_{ср} \pm \Delta x_{ср})$, мг	74,48 ± 0,93

Таблиця 3. Розчинність хлориду свинцю у воді при різних температурах [5]

T, ^{0}C	0	20	30	40	50	60	80	100
Розчинність хлориду свинцю, г/100 г	0,673	0,99	1,2	1,45	1,70	1,98	2,62	3,34

Для вивчення впливу свинцю на гравіметричне визначення срібла, в розчин, який аналізують, вводили певні кількості нітрату свинцю. При збільшенні кількості введеного нітрату свинцю спостерігалось виділення кристалів хлориду свинцю, які не розчинялись при промиванні холодною водою. Дані наведені в табл. 4.

Таблиця 4. Вплив свинцю на гравіметричне визначення срібла

Введено Pb, мг	0	100	150	200	1000	2000
Маса осаду, мг	78,88	79,85	80,16	80,75	135,2	298,1

Як видно з табл.4, при збільшенні кількості свинцю зростає маса осаду.

Для усунення впливу свинцю було досліджено вплив температури на розчинність хлориду свинцю. Для цього осад на фільтрі промивали гарячою водою (80-90^{0}C). При цьому хлорид свинцю відмивався повністю і не заважав визначенню срібла у співвідношенні Pb:Ag = 25:1, що цілком достатньо для гравіметричного визначення макрокількостей срібла у відходах електронної промисловості.

Для перевірки методики було проведене визначення срібла на реальних об'єктах (відходи електронної промисловості) двома методами: титриметричним за ДСТУ та запропонованим нами гравіметричним із промиванням осаду на фільтрі гарячою (80-90^{0}C) водою для видалення свинцю. Результати визначення вмісту срібла наведені в табл. 5.

Як видно з табл.5, результати визначення вмісту срібла у відходах двома незалежними методами співпадають у межах похибки.

Таблиця 5. Результати визначення срібла у відходах електронної промисловості

№ проби	Вміст срібла, %	
	Титриметричний метод	Гравіметричний метод
1	45,7 ± 0,5	46,0 ±0,4
2	22,3 ± 0,3	22,4 ± 0,2

Таким чином, розроблена прискорена та більш екологічна методика визначення срібла у відходах електронної промисловості. Час аналізу скорочено з трьох діб до 2,5 годин.

РЕЗЮМЕ

Разработана методика гравиметрического определения серебра в отходах электронной промышленности. Значительно сокращено время анализа.

SUMMARY

The procedure of gravimetric determination in waste of electronic industry was elaborated. The time of analysis was considerable reduced.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. ДСТУ 2829.2-94 Брухт і відходи дорогоцінних металів і сплавів. Методи визначення срібла. – К.: Держстандарт України, 1994. – С. 69-75.
2. Пятницкий И.В., Сухан В.В. Аналитическая химия элементов. Серебро. – М.: Наука, 1975. – 264 с.
3. ГОСТ 8.010-99 Межгосударственный стандарт. Методики выполнения измерений. Основные положения. – К.: Госстандарт Украины, 2002.
4. ГОСТ 8.207-76 Прямые измерения с многократными наблюдениями. Методы обработки результатов наблюдений.
5. Лурье Ю.Ю. Справочник по аналитической химии. Справочное издание. – М.: Химия, 1989. – 448 с.

Надійшла до редакції 08.10.2007 р.

УДК 544.473:544.476

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ МЕЖФАЗНОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ С РАЗВЕТВЛЕННЫМ КАТАЛИТИЧЕСКИМ ЦИКЛОМ

О.В.Баранова, В.С.Дорошкевич, А.Н.Шендрик, В.А.Савелова,*
**Белгородский государственный университет, Россия*

В современном органическом синтезе активно реализуются принципы межфазного катализа [1,2], что обусловлено рядом преимуществ этих гетерофазных процессов перед гомофазными [3,4]. В то же время изучение механизмов межфазно-каталитических (МФК) реакций, их кинетическое описание связано с определенными трудностями из-за отсутствия широкодоступных методов определения квазистационарных концентраций промежуточных частиц по ходу процесса. Поэтому в настоящее время для интерпретации кинетических исследований, доказательства механизмов МФК-процессов широко применяются методы математического моделирования [5,6].

Особый интерес представляют МФК – реакции с разветвленным каталитическим циклом. В настоящей работе выполнено моделирование кинетики такого процесса на примере реакции щелочного гидролиза 4-нитрофенилового эфира N-бензилоксикарбонилглицина (1) в двухфазной системе жидкость/жидкость в присутствии галогенидов тетрафенилфосфония в качестве межфазных катализаторов при объемном соотношение фаз 1:1.

$$\underset{S}{C_6H_5CH_2OC(O)NHCH_2COOC_6H_4NO_2\text{-}4} + 2OH^- \xrightarrow[QZ,\ T=298\ K]{pH = 10.0} \longrightarrow C_6H_5CH_2OC(O)NHCH_2COO^- + 4\text{-}NO_2C_6H_4O^- + H_2O \qquad (1)$$

Выбор галогенидов тетрафенилфосфония обусловлен их высокой активностью в МФК – реакциях, протекающих в системе жидкость/жидкость [7]. Ранее нами было установлено [8], что константа скорости реакции (1) зависит от природы противоиона межфазного катализатора и непостоянна по ходу процесса. Это было объяснено конкурентной экстракцией анионов.

В изучаемом МФК – процессе участвуют три аниона: противоион межфазного катализатора ($Z = Cl^-, Br^-, J^-$), нуклеофил ($Y = OH^-$) и нуклеофуг ($X = ArO^-$ / 4-нитрофенолят-анион). В этих условиях возникает конкурентное взаимодействие трех анионов за образование ионной пары с катионом катализатора Q^+ – тетрафенилфосфоний катионом. В результате в каталитическом цикле появляется точка разветвления на катионе катализатора, что отражает следующая схема.

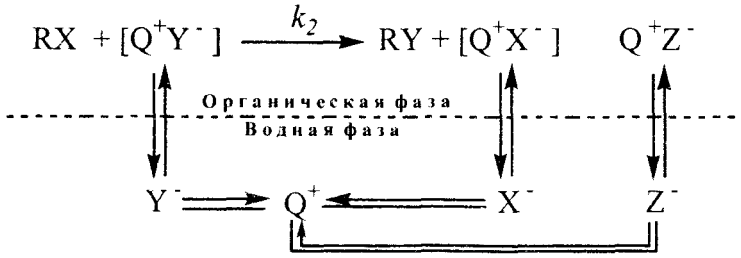


Схема. Модель экстракционного механизма с разветвленным циклом.

В общем случае МФК – процесс включает в себя стадию экстракции нуклеофила в органическую фазу и лимитирующую скорость стадию химического взаимодействия.

Для скорости целевой реакции в органической фазе можно записать уравнение (2):

$$\upsilon = k_s[S]_o \cdot [QOH]_o \qquad (2)$$

где k_s (л·моль$^{-1}$·с$^{-1}$)- константа скорости реакции второго порядка в органической фазе; $[S]_o$ (моль/л) – концентрация субстрата в органической фазе, $[QOH]_o$ (моль/л) – концентрация гидроксид-иона, перенесенного в органическую фазу в виде ионной пары с катионом катализатора Q^+.

© Баранова О.В., Дорошкевич В.С., Шендрик А.Н., Савелова В.А.

Из уравнения (2) видно, что скорость изучаемой МФК-реакции (1) контролируется квазистационарной концентрацией активной формы катализатора QOH. Для выяснения закономерностей изменения $[QOH]_o$ в ходе процесса было проведено полное моделирование кинетики изучаемой реакции путем решения прямой кинетической задачи. В модель заложена следующая кинетическая схема процесса:

$$QZ_o \underset{k_{-0}}{\overset{k_0}{\rightleftharpoons}} Q^+_в + Z_в^- \qquad (3)$$

$$QOH_o \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} Q^+_в + OH_в^- \qquad (4)$$

$$S_o + QOH_o \xrightarrow{k_s} QArO_o + Pr_в \qquad (5)$$

$$QArO_o + OH_в^- \underset{k_{-2}}{\overset{k_2}{\rightleftharpoons}} QOH_o + ArO_в^- \qquad (6)$$

$$QArO_o + Z_в \underset{k_{-3}}{\overset{k_3}{\rightleftharpoons}} QZ_o + ArO_в^- \qquad (7)$$

Предполагали, что в начальный момент реакции в системе быстро устанавливаются экстракционные равновесия (3) и (4). С накоплением некоторого количества 4 – нитрофенолят-аниона появляются дополнительные экстракционные потоки (6) и (7), под влиянием которых изменяются начальные величины равновесных концентраций и в реакциях (3), (4).

Моделирование кинетики реакции (1) было проведено при таких же концентрациях субстрата $[S]$=0.005 М и катализатора $[QZ]$=0,01М, при которых выполнены экспериментальные измерения константы скорости реакции k_s [8]. При этом считали, что скоростьопределяющей стадией является реакция в органической фазе, а экстракция исходной формы межфазного катализатора зависит от природы его противоиона [8]. Был принят также во внимание тот факт, что константа скорости k_s для солей с одинаковой по структуре катионной частью не должна зависеть от природы противоиона межфазного катализатора, т.к. в органической фазе с субстратом S_o взаимодействует ионная пара QOH (см. уравнение 2).

Стерические факторы исследуемых соединений, температура реакционной смеси, скорость перемешивания двухфазной системы, а также природа фаз не учитывались, поскольку от опыта к опыту они не изменялись.

Подбор констант вели в направлении наилучшего совпадения между экспериментально определенными и рассчитанными концентрациями продукта реакции по всему ходу кинетической кривой.

В таблице представлены константы скорости элементарных стадий (3), (4), (5), (6), (7), полученных в результате моделирования. При этих значениях наблюдается наилучшее совпадение экспериментальных данных с рассчитанными на основе модели.

Таблица. Теоретически подобранные константы скорости реакции (5) и ионного обмена (3), (4), (6), (7) для процессов в присутствии галогенидов тетрафенилфосфония

	X = Cl^-	X = Br^-	X = J^-
k_0, $с^{-1}$	1000	1000	100
k_{-0}, л / моль·с	30000	200000	500000
k_1, $с^{-1}$	10000	10000	50000000
k_{-1}, л / моль·с	30000	25000	400
k_s, л / моль·с	0.6	0.7	0.5
k_2, л / моль·с	100	3000	50000
k_{-2}, л / моль·с	5000	100	100
k_3, л / моль·с	1000	1	100
k_{-3}, л / моль·с	100	1	2000000

Кинетические кривые для исходных, промежуточных и конечных веществ реакции (1) в двухфазной системе хлороформ/боратный буферный раствор (pH=10.0) в присутствии фосфониевых солей представлены на рис. 1 – 3.

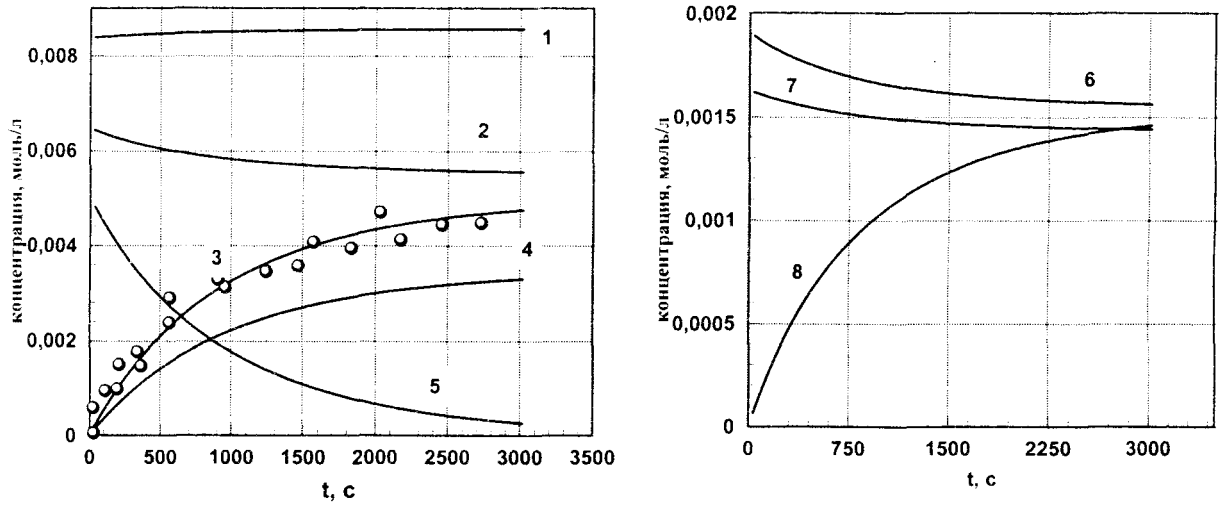


Рис.1. Кинетические кривые, полученные в ходе моделирования для реакции (1) в присутствии Ph_4PCl . Сплошные линии – расчет; точки – эксперимент, [S] = 0.005 моль/л, [Ph_4PCl]=0.01моль/л.

1- $Z_в^-$, 2- $Q_в^+$, 3-Pr, 4- $ArO_в^-$, 5- S , 6- QZ_o , 7- QOH_o , 8- QAr_o

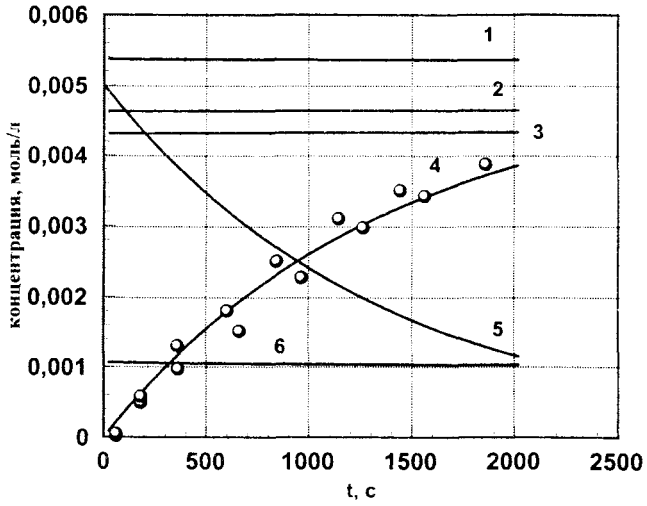


Рис. 2. Кинетические кривые, полученные в ходе моделирования для реакции (1) в присутствии Ph_4PBr . Сплошные линии – расчет; точки – эксперимент, [S] = 0.005 моль/л, [Ph_4PBr]=0.01моль/л.

1- $Z_в^-$, 2- QZ_o , 3- $Q_в^+$, 4-Pr, 5- S , 6- QOH_o .

В модель для всех катализаторов была заложена практически одинаковая константа скорости целевой реакции k_s (см. таблицу). В эксперименте реакция (1) в присутствии Ph_4PCl характеризуется незначительным ингибированием [8], следовательно, концентрация QOH_o в органической фазе во времени должна уменьшаться. Кривая (7) рис.1. изменения концентрации QOH_o в модели отражает этот факт. При катализе Ph_4PBr скорость процесса (1) постоянна с течением времени, следовательно, концентрация ионной пары QOH_o должна оставаться постоянной (см. кривая (6), рис.2). Для кинетики реакции (1) в присутствии Ph_4PJ наблюдается закономерности, характерные для автокатализа: после некоторого индукционного периода скорость процесса растет, что должно быть связано с увеличением [QOH_o] (см. рис.3, кривая (6)).

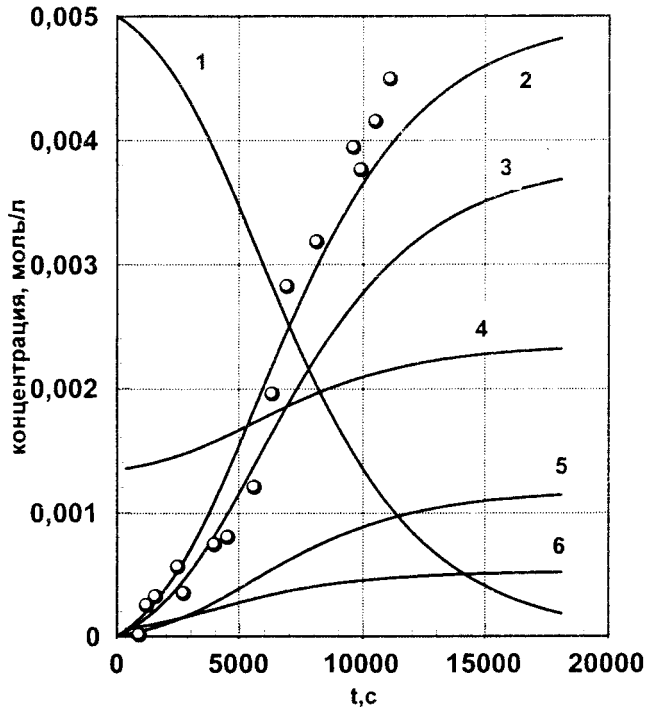


Рис.3. Кинетические кривые, полученные в ходе моделирования для реакции (1) в присутствии Ph_4PJ . Сплошные линии – расчет; точки – эксперимент, [S] = 0.005 моль/л, [Ph_4PJ]=0.01моль/л.

1- S , 2-Pr, 3- $ArO_в^-$, 4- $Z_в^-$, 5- QAr_o , 6- QOH_o .

Таким образом, концентрация QOH в органической фазе падает для хлоридной (рис.1), остается постоянной для бромидной (рис. 2) и несколько возрастает для йодидной (рис.3) солей по ходу процесса, что согласуется с наблюдаемыми в эксперименте кинетическими эффектами [8] и может служить косвенным свидетельством в пользу предложенного механизма реакции. В целом, можно говорить, что исследуемая МФК – реакция протекает в органической фазе по экстракционному механизму в условиях конкурентной экстракции нуклеофила, нуклеофуга и противоиона межфазного катализатора.

Материалы и методы исследования

Решение систем дифференциальных уравнений проводили с помощью программы Kinetics 2.2, алгоритм которой разработан Соколовым и Уткиным из Ярославского технического университета. В процессе моделирования в программный модуль Kinetics 2.2 были внесены экспериментальные значения концентраций галогенид – иона Z^-, катиона тетрафенилфосфония Q^+, 4-нитрофенолят-иона ArO^-, нуклеофила OH^-

Выводы

1. В результате решения прямой кинетической задачи подобраны константы скорости элементарных реакций процесса щелочного гидролиза 4-нитрофенилового эфира N-бензилоксикарбонилглицина, объяснены основные кинетические закономерности, которые наблюдаются в эксперименте.
2. По содержанию активной формы ионной пары (QOH) можно прогнозировать каталитическую активность фосфониевых солей, которые применяются в качестве катализатора межфазного переноса в системе жидкость/жидкость. Информация такого рода может служить дополнением к планированию кинетического эксперимента.
3. Совпадение экспериментальных значений с расчетными является косвенным подтверждением в пользу экстракционного механизма межфазной реакции.

РЕЗЮМЕ

Методом розв'язання прямої кінетичної задачі проведено моделювання трансфазнокаталітичної реакції лужного гідролізу активованих ефірів амінокислот у двофазному середовищі рідина/рідина.

SUMMARY

The simulation of the Phase Transfer reaction of activated amino acid esters alkaline hydrolysis in two-phase system liquid/ liquid was carried out with resolving of direct kinetic problem.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sanjeev D. Naik and L. K. Doraiswamy Phase Transfer Catalysis: Chemistry and Engineering // AIChE Journal. – 1998. – Vol. 44, No. 3. p. 612-646.
2. M. Halpern. Increasing Plant Profits by Phase-Transfer Catalysis Retrofit // Phase-Transfer Catalysis Communications. – 1996. – Vol.2, № 1. p.1-14.
3. Ganapati D. Yadav, Yogeeta B. Jadhav. Cascade engineered phase transfer catalysis: a novel concept in green chemistry // Clean Technologies and Environment Policy. – 2003. – Vol. 6. № 1. p.32-43.
4. Межфазный катализ. Химия, катализаторы и применение / Под ред. Ч.М. Старкса. – М.: Химия, 1991. – С. 38-49.
5. Justinus A. B. Satrio, L. K. Doraiswamy. Phase-transfer catalysis: a new rigorous mechanistic model for liquid–liquid systems // Chemical Engineering Science. – 2002. – Vol. 57. – P.1355-1377
6. Кинетическая модель МФК-аминолиза 4-нитрофенилацетата твердым глицинатом калия / Вахитова Л. Н., Савелова В. А., Бурдина Я. Ф. и др. // Теорет. и эксперим. химия. – 2004. – Т.40. №5. – С. 285-290
7. Влияние структуры межфазного катализатора на скорость щелочного гидролиза 4-нитрофенилового эфира N – бензилоксикарбонилглицина в системе хлороформ – боратный буферный раствор / Космынин В.В., Савелова В.А., Шендрик А.Н. и др. // ЖОрХ. – 2002, Т.38, Вып. 3 – С.400-406
8. Межфазный катализ щелочного гидролиза 4-нитрофенилового эфира N-бензилоксикарбонилглицина в двухфазной системе хлороформ – боратный буфер / Баранова О.В., Космынин В.В., Савелова В.А. и др. // ЖОрХ. – 2001. – Т.37, Вып.5. – С.705-711.

Надійшла до редакції 10.09.2007 р.

УДК 547:544.421.032.76

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ И ТЕМПЕРАТУРЫ НА СКОРОСТЬ РЕАКЦИЙ 4-НИТРОФЕНИЛОКСИРАНА С АРЕНСУЛЬФОНОВЫМИ КИСЛОТАМИ В СМЕСИ ДИОКСАНА С ДИХЛОРЭТАНОМ

И.В.Шпанько, И.В.Садовая

Реакции раскрытия оксиранового цикла привлекают внимание исследователей на протяжении многих десятилетий [1-4]. Актуальной задачей химии оксиранов является установление количественных закономерностей раскрытия оксиранового цикла кислотными реагентами [5-7] под воздействием различных перекрестно варьируемых факторов (структура, среда, температура и т. д.). В данном аспекте эти процессы еще мало изучены.

В нашей работе изучено перекрестное влияние структуры аренсульфокислот (Y = 4-OCH_3, 4-CH_3, H, 4-Cl) и температуры (265, 286, 300 K) на скорость их взаимодействия с 4-нитрофенилоксираном в смеси диоксана с дихлорэтаном (объемное соотношение 7:3):

$$4\text{-}NO_2C_6H_4CH(O)CH_2 + YC_6H_4SO_3H \rightarrow 4\text{-}NO_2C_6H_4CH(OSO_2C_6H_4Y)CH_2OH. \qquad (1)$$

Как было установлено ранее [5-7], продуктами реакций арилоксиранов с кислотными реагентами являются первичные спирты. Для измерения скорости процесса взаимодействие между реагентами прерывали добавлением в кинетическую пробу раствора HBr в ледяной уксусной кислоте. По истечении 45 минут не вступившее в реакцию с оксираном избыточное количество HBr определяли потенциометрическим титрованием водным раствором $AgNO_3$. Кинетику реакций (1) изучали при более чем десятикратном избытке аренсульфоновых кислот (HA) относительно начальной концентрации оксиранового субстрата (S): $[HA]_0 >> [S]_0 = (2 - 8)\cdot10^{-3}$. Во всех случаях при фиксированных концентрациях $[HA]_0$ наблюдаемые константы скорости псевдопервого порядка (k_1, c^{-1}) сохраняли постоянство по ходу процесса (погрешность их определения не превышала 5 %) и не изменялись при варьировании $[S]_0$, т. е. выполнялся первый порядок по оксирану. Вместе с тем между k_1 и $[HA]_0^2$ соблюдались прямолинейные зависимости ($r \geq 0.991$) с экстраполяцией на начало координат, что указывает на второй порядок относительно HA. Итак, исследуемый процесс имеет общий третий порядок и его скорость описывается уравнением:

$$-d[S]/dt = k_1[S] = k_3[S][HA]_0^2. \qquad (2)$$

Константы скорости третьего порядка k_3, рассчитанные из зависимости $k_1 = k_3[HA]_0^2$ для всех исследованных реакций приведены в табл. 1. Они возрастают с повышением температуры, а также с ослаблением электронодонорных и усилением электроноакцепторных свойств заместителей Y.

Таблица 1. Константы скорости $k_3\cdot10^2$ ($л^2\cdot моль^{-2}\cdot с^{-1}$) реакций 4-нитрофенилоксирана с аренсульфоновыми кислотами ($YC_6H_4SO_3H$) в смеси диоксана с дихлорэтаном (7:3 по объему) при разных температурах

Y (σ_Y)	265 K	286 K	300 K
4-OCH_3 (-0.27)	0.516 ± 0.007	2.21 ± 0.06	4.8 ± 0.6
4-CH_3 (-0.17)	0.57 ± 0.02	2.7 ± 0.1	6.07 ± 0.08
H (0)	0.84 ± 0.07	4.04 ± 0.04	12.4 ± 0.1
4-Cl (0.23)	1.12 ± 0.03	7.8 ± 0.2	22.2 ± 0.7

Вычисленные по уравнению Гаммета реакционные константы ρ_Y (r) для частных реакционных серий при 265, 286 и 300 K соответственно равны 0.70 ± 0.06 (0.994), 1.11 ± 0.04 (0.998), 1.4 ± 0.1 (0.994). Обращает на себя внимание увеличение ρ_Y с повышением температуры, что указывает на проявление неаддитивного характера совместных эффектов заместителей Y и температуры в перекрестной реакционной серии (1). Между ρ_Y и обратным значением температуры (T, K) выполняется линейная зависимость: $\rho_Y = (6.6 \pm 0.3) + (-1.58 \pm 0.08)\cdot1000/T$, $S_0 = 0.025$, $r = 0.999$, угловой наклон которой соответствует коэффициенту перекрестного взаимодействия указанных факторов.

Влияние температуры на скорость реакций (1) оценивали с помощью уравнения Эйринга:

$$lg(k_3/T) = A + B_T(1000/T), \qquad (3)$$

© Шпанько И.В., Садовая И.В.

где $A = lg(k_B/h) + \Delta S^{\neq}/2.3R$, $B_T = -\Delta H^{\neq}/2.3R$ (k_B – постоянная Больцмана, h –постоянная Планка, R – газовая константа). В табл. 2 приведены значения параметров уравнения (3) для всех реакций Y-замещенных аренсульфокислот, а также рассчитанные с использованием этих параметров величины энтальпии ($\Delta H^{\neq}$), энтропии ($\Delta S^{\neq}$) и свободной энергии ($\Delta G_{286}^{\neq}$) активации. Значения B_T для частных реакционных серий линейно связаны с константами σ_Y закрепленных заместителей Y: $B_T = (-2.48 \pm 0.01) + (-1.52 \pm 0.05)\sigma_Y$, $S_0 = 0.018$, $r = 0.999$, что еще раз подтверждает неаддитивность эффектов перекрестно варьируемых факторов. Наклон этой зависимости совпадает в пределах ошибки с приведенным выше коэффициентом перекрестного взаимодействия.

Таблица 2. Значения коэффициентов уравнения (3) и активационых параметров реакций 4-нитрофенилоксирана с аренсульфоновыми кислотами ($YC_6H_4SO_3H$) в смеси диоксана с дихлорэтаном (7:3 по объему)

Y	A	$-B_T$	r	S_0	$\Delta H^{\neq}$, кДж/моль	$-\Delta S^{\neq}$, Дж/моль·К	$\Delta G_{286}^{\neq}$, кДж/моль
4-OCH_3	3.1 ± 0.4	2.07 ± 0.06	0.999	0.021	40	138	79
4-CH_3	3.7 ± 0.2	2.21 ± 0.07	0.999	0.023	42	127	78
H	5.0 ± 0.5	2.5 ± 0.1	0.998	0.045	48	102	77
4-Cl	6.3 ± 0.2	2.81 ± 0.07	0.999	0.023	54	77	76

Таким образом, для количественного учета совместного влияния заместителей Y в аренсульфоновых кислотах и температуры на скорость реакций (1) следует использовать следующее уравнение перекрестной корреляции:

$$lgk_3 = lgk_3^{cm} + \rho_Y^{cm}\sigma_Y + B_T^{cm}(1/T) + q_{YT}\sigma_Y(1/T), \qquad (4)$$

где k_3^{cm} – константа скорости в стандартных условиях ($\sigma_Y = 0$, $1/T = 0$), ρ_Y^{cm} и B_T^{cm} – параметры стандартных реакций (соответственно $1/T = 0$ и $\sigma_Y = 0$), q_{YT} = коэффициент перекрестного взаимодействия. При расчете параметров уравнения (4) по программе мультилинейного регрессионного анализа (доверительный уровень 95%) получен следующий результат:

$$lgk_3 = (7.7 \pm 0.1) + (6.4 \pm 0.7)\sigma_Y + (-2.61 \pm 0.04)\cdot 1000/T + (-1.5 \pm 0.2)\sigma_Y \cdot 1000/T, \qquad (5)$$
$$S_0 = 0.025;\ R = 0.998;\ F = 1592,\ n = 12.$$

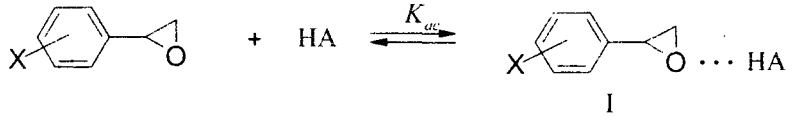
Благодаря статистически значимому коэффициенту перекрестного взаимодействия ($q_{YT} = -1.5 \pm 0.2$) регрессия (5) относится к изопараметрической. Ее атрибутами являются изопараметрические точки (ИПТ) по константе заместителя $\sigma_Y^{ИП} = -B_T^{cm}/q_{YT} = -1.74$ и по температуре $T^{ИП} = (-q_{YT}/\rho_Y^{cm})\cdot 10^3 = 234$ K, а также одинаковая константа скорости в этих точках ($lgk_3^{ИП} = lgk_3^{cm} - \rho_Y^{cm}B_T^{cm}/q_{YT} = -3.44$, $k_3^{ИП} = 3.63\cdot 10^{-4}$, $л^2\cdot моль^{-2}\cdot с^{-1}$). При изопараметрической (изокинетической) температуре $T^{ИП} = 234$ K на скорость процесса не будут оказывать влияние заместители Y в аренсульфоновых кислотах, а свободная энергия активации $\Delta G^{\neq} = const$ вследствие компенсации в изменении ее энтальпийной ($\Delta H^{\neq}$) и энтропийной ($T\Delta S^{\neq}$) составляющих (компенсационный эффект: $\delta_Y\Delta H^{\neq} = T^{ИП}\delta_Y\Delta S^{\neq}$). Из-за чего $\delta_Y\Delta G^{\neq} = \delta_Y\Delta H^{\neq} - T^{ИП}\delta_Y\Delta S^{\neq} = 0$ и $\rho_Y = 0$. В ИПТ $\sigma_Y^{ИП} = -1.74$ скорость не должна зависеть от температуры. В этой ИПТ $\Delta H^{\neq} = 0$, что также вытекает из уравнения $\Delta H^{\neq} = (47.5 \pm 0.3) + (29 \pm 1)\sigma_Y$, $S_0 = 0.594$, $r = 0.997$ (при $\sigma_Y = -1.63$ $\Delta H^{\neq} = 0$).

Итак, проведенный перекрестный корреляционный анализ показывает, что реакции (1) характеризуются двумя ИПТ – по константе заместителя Y в аренсульфоновых кислотах ($\sigma_Y^{ИП} = -1.74$) и по температуре ($T^{ИП} = 234$ K). Однако, обе эти ИПТ соответствуют минимуму реакционной способности системы и выходят далеко за пределы экспериментальной достижимости.

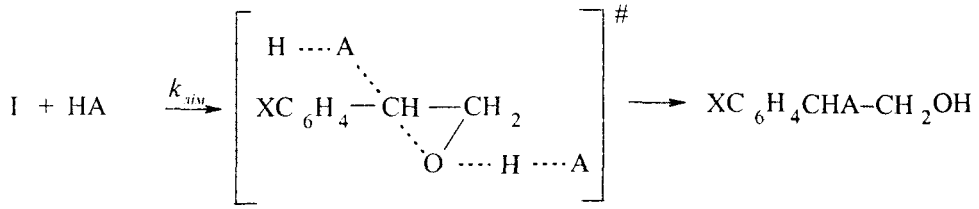
На основании совокупности полученных результатов для описания механизма процесса нами предложена схема (6). Этот механизм согласуется с общим третьим порядком реакций (1), первым по оксирановому субстрату (X = 4-NO_2) и вторым по кислотному реагенту HA, и предусматривает образование на первой равновесной стадии комплекса I с H-связью. На второй, определяющей скорость стадии, активированный субстрат подвергается нуклеофильной атаке второй молекулой кислоты по α-атому углерода оксиранового цикла, занимающему бензильное положение, с образованием тримолекулярного переходного состояния (ПС) II. Эта стадия реализуется по механизму согласованного нуклеофильного замещения A_ND_N с электрофильным содействием разрыву связи C–O.

Согласно схеме (6) $k_3 = K_{ac}\cdot k_{лим}$, из чего следует, что параметр чувствительности ρ_Y к эффектам заместителей Y из-за стадийности процесса является сложной величиной, $\rho_Y = \rho_1 + \rho_2$, причем $\rho_1 > 0$ на первой стадии, а знак и величина $\rho_2 = \rho_{A\text{-}C} + \rho_{O\text{-}H}$ на второй стадии определяется соотношением величин

$\rho_{A\text{-}C} < 0$ и $\rho_{O\text{-}H} > 0$ при образовании соответственно связей A-C и O-H в ПС II. Тот факт, что во всех частных реакционных сериях эффективная величина $\rho_Y > 0$ (см. выше), указывает на преобладание электрофильных свойств кислотного реагента HA на обеих стадиях формирования связи O-H над его нуклеофильными свойствами на второй стадии при образовании связи A-C: $\rho_1 + \rho_{O\text{-}H} > |\rho_{A\text{-}C}|$.



I



II

(6)

Со снижением температуры параметр ρ_1 должен увеличиваться вследствие укрепления H-связи в комплексе I. Наблюдаемое при этом уменьшение эффективной величины ρ_Y указывает на более значительное увеличение абсолютного значения ее отрицательной составной части $\rho_{A\text{-}C}$. При изопараметрической температуре $T^{ИП} = 234$ K $\rho_Y = 0$, что возможно, если $\rho_1 + \rho_{O\text{-}H} = |\rho_{A\text{-}C}|$. Таким образом, мы приходим к выводу, что взаимодействие эффектов заместителей Y и температуры в исследованных реакциях осуществляется на стадии раскрытия оксиранового цикла.

С этим же выводом согласуется изменение активационных параметров $\Delta H^{\neq}$ и $\Delta S^{\neq}$ при варьировании заместителей Y. В соответствии с представленными на схеме (6) стадиями процесса и их механистическими аспектами можно прийти к заключению, что $\Delta H^{\neq} = \Delta H_1 + \Delta H_2^{\neq}$, причем $\Delta H_1 < 0$ [8], $\Delta H_2^{\neq} > 0$ [9], и $\Delta S^{\neq} = \Delta S_1 + \Delta S^{\neq}_2$ ($\Delta S_1 < 0$ [8], а знак $\Delta S^{\neq}_2$ зависит от характера ПС II, о чем речь пойдет ниже). Переход от электроноакцепторных заместителей Y к электронодонорным вызовет ослабление H-связи в комплексе I и повлечет за собой уменьшение абсолютного значения $|\Delta H_1|$, в результате чего следует ожидать увеличения эффективной энтальпии активации $\Delta H^{\neq}$, что противоречит данным табл. 2. В итоге мы приходим к выводу, что в реакционной серии (1) решающее влияние заместителей Y на величину $\Delta H^{\neq}$, а значит и на характер совместных эффектов структуры и температуры, осуществляется на стадии формирования ПС II, а именно за счет интенсивного уменьшения $\Delta H_2^{\neq}$ из-за усиления нуклеофильности HA электронодонорными заместителями Y.

В ИПТ $\sigma_Y^{ИП} = -1.74$, которая соответствует очень слабой аренсульфоновой кислоте, H-связь в комплексе I настолько ослабится, что $\Delta S_1 = 0$, а отрицательное значение ΔH_1 по абсолютной величине может сравняться с $\Delta H_2^{\neq}$ ($|\Delta H_1| = \Delta H_2^{\neq}$) и в итоге $\Delta H^{\neq} = 0$ (скорость процесса окажется не зависимой от температуры). Также в этой ИПТ чрезвычайно сильный электронодонорный заместитель Y ослабит диссоциативный характер ПС II через усиление нуклеофильности HA. Вследствие этого $|\Delta S_{A\text{-}C}^{\neq}| + |\Delta S_{O\text{-}H}^{\neq}| > \Delta S_{C\text{-}O}^{\neq}$ и $\Delta S_2^{\neq} < 0$, что в конце концов приведет к значительному уменьшению эффективной энтропии активации в данной ИПТ ($\Delta S^{\neq} = -320$ Дж/моль·K). В этом случае, поскольку $\Delta H^{\neq} = 0$, то только энтропийная составляющая свободной энергии активации будет определять скорость процесса.

Таким образом, в данной работе показана перспективность метода перекрестного корреляционного анализа в количественном изучении тонких деталей совместного влияния структуры и температуры на скорость и механизм реакций раскрытия оксиранового цикла.

РЕЗЮМЕ

Вивчено кінетику реакцій 4-нітрофенілоксирану з аренсульфоновими кислотами $YC_6H_4SO_3H$ (Y = 4-OCH_3, 4-CH_3, H, 4-Cl) у суміші діоксану з дихлоретаном (7:3 за об'ємом) при 265, 286, 300 K. Проведено перехресний кореляційний аналіз кінетичних результатів. Показано, що сумісні ефекти структури і температури у перехресній реакційній серії є неадитивними. Визначені ізопараметричні точки відносно параметрів варійованих факторів та запропонована їх механістична інтерпретація.

SUMMARY

The kinetics of reactions between 4-nitrophenyloxirane and arensulfonic acids $YC_6H_4SO_3H$ (Y = 4-OCH_3, 4-CH_3, H, 4-Cl) in dioxane – dihloretane mixture (7:3, v:v) at 265, 286, 300 K have been studied. Cross-correlation analysis of kinetic

data was conducted. It was found, that combined effects of structures and temperatures are nonadditive. The isoparametric points with respect to the parameters of varied factors were evaluated and theirs mechanistic interpretation was proposed.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Касьян Л.И., Касьян А.О., Оковитый С.И. // Журн. орган. химии. – 2006. – **42**, вып. 3. – С.327-354.
2. Саломатина О.В., Яровая О.И., Бархаш В.А. // Журн. орган. химии. – 2005. – **41**, вып. 2. – С.167-197.
3. Касьян Л.И., Оковитый С.И., Касьян А.О. // Журн. орган. химии. – 2004. – **40**, вып. 1. – С.11-42.
4. Dormer J., Moodie R.B. // J. Chem. Soc. Perkin Trans. II. – 1994. – № 6. – P.1195-1200.
5. Шпанько И.В., Садовая И.В. // Укр. хим. журн. – 2005. – **71**, № 3. – С.60-63.
6. Шпанько И.В., Садовая И.В. // Укр. хим. журн. – 2003. – **69**, № 6. – С.111-115.
7. Shpan'ko I.V., Sadovaya I.V., Kitaigorodskii A.M. // Mendeleev Commun. – 2001. – № 2. – P.83-84.
8. Днепровский А.С., Темникова Т.И. Теоретические основы органической химии. – Л: Химия, 1979.
9. Власов В.М. // Успехи химии. – 2006. – **75**, № 9. – С.851-883.

Надійшла до редакції 16.05.2007 р.

Б І О Л О Г І Я

УДК 574.4

ФОРМУВАННЯ ҐРУНТОВОГО ПОКРИВУ В УМОВАХ ПОСТТЕХНОГЕННИХ ЛАНДШАФТІВ КРИВБАСУ (НА ПРИКЛАДІ ЛАНДШАФТНОГО ЗАКАЗНИКА «ВІЗИРКА»)

О.М.Сметана, Г.В.Кайко**, М.О.Квітко*,*
**Криворізький ботанічний сад НАН України, **Криворізький технічний університет*

Територія Криворіжжя є досить складною у плані структурної організації ґрунтового покриву, який у своєму розвитку обумовлений сполученням чинників природного та техногенного характеру. Значну частку території регіону займають посттехногенні ландшафтні системи – кар'єрно-відвальні комплекси. Дослідження цих систем проводились у багатьох напрямках, проте комплексний їх аналіз на сьогодні практично відсутній. Просторова організація ґрунтового покриву південної частини Криворіжжя була висвітлена в друкованих роботах Сметани М.Г., Сметани О.М., Красової О.О. [1, 2]. Територіальна організація ґрунтового покриву стаціонару «Всебратське», який знаходиться у центральній частині міста був розглянутий Сметаною О.М., Кайко Г.В. [3]. Структура ґрунтового покриву гранкар'єрів була проаналізована Сметаною О.М. та Квітко М.О. [4].

У монографії Сметани О.М., Перерви В.В. [5] були висвітлені вміст, запаси та груповий склад гумусу промділянок Кривбасу.

Дана робота спрямована на встановлення закономірностей формування ґрунтів і ґрунтового покриву в умовах посттехногенних ландшафтів. Для вирішення даної задачі були закладені розрізи на території кар'єрно-відвального ландшафтного комплексу «Візирка», який знаходиться в районі ВАТ «ІнГЗК». Макроморфологічна характеристика ґрунтів була встановлена за загальноприйнятими методиками, індексація подана згідно української номенклатури [6].

Нами був проаналізований сольовий стан домінуючих виділів ґрунтового покриву відвалу «Візирка». Для цього було обрано 5 репрезентативних розрізів. Аналіз водної витяжки був проведений за загальноприйнятими методиками [7]. Вміст та запаси гумусу визначались за методикою Орлова [8], груповий склад за Кононовою-Бєльчиковою [9].

Ґрунти кар'єро-відвальних ландшафтних комплексів за макроморфологічними ознаками віднесені нами до примітивних ґрунтів (ембріоземів). Наводимо макроморфологічну характеристику ґрунтів розкритих окремими розрізами.

Розріз 1в закладений на вершині насипу з бурих глин на старому відвалі «Візирка».

В рослинному покриві співдомінують Koeleria cristata (L.) Pers., Poa angustifolia L.: проективне покриття 85%. В деревному ярусі – Cerasus magaleb (L.) Mill., Armeniaca vulgaris Lam. Зімкненість деревного ярусу 0,3-0,4.

Поверхня ґрунтів покрита фрагментарною підстилкою, калданом. Підстилка з частково гуміфікованого листя абрикосу, вишні-магалебки. Відмічені гнізда мурах роду Myrmica.

H – 0-2 см. Слабо скипає від 10% HCl, сірий з бурим відтінком, порохуватий, зернисті агрегати не міцні, щільно пронизаний корінням трав і ризоїдами моху, мінеральна фракція чітко диференціюється на піскувату (вапняковий пісок) і глинисту агрегатовану; легкосуглинистий. Переходить в hP чітко за щільністю, структурою, кольором.

hP – 2-7 см. Середньосуглинистий, бурий з сірим відтінком, не міцні порохуваті агрегати, піскувата фракція відсутня, не скипає від 10% HCl, щільніше попереднього, пронизаний корінням трав.

P – 7-40 см. Бурі глини.

В цілому, в профілі відмічені одиничні включення карбонатів кальцію, гіпсу, охристих пісків, мергеля сірого. Скипання з верхніх 2 см і по включенням карбонатів. У ґрунті виразно видно вимивання мулистої і глинистої фракції і її винос транзитними потоками. У нижній частині підстилається уламковими вапняками (40-50 см).

Примітивні нерозвинені суглинисті ґрунти.

Розріз 2в розташований в 15 м на північ від розрізу 1в в западині між насипами з бурих глин.

В рослинному покриві домінують Koeleria cristata, Poa angustifolia: проективне покриття 95%. В деревному ярусі – Cerasus magaleb, Armeniaca vulgaris. Зімкненість 0,3-0,4.

Ґрунт не скипає від 10% HCl, скипає тільки підстилаюча порода (D).

H – 0-2 см. Темно-сірий з бурим відтінком, комкувато-порохуватий, грудкуваті агрегати міцні, фітогенні; помірно щільний, пористість 45-50%, важкосуглинистий до глинистого, густо пронизаний корінням трав, вертикальне розтріскування за всім профілем. Перехід затьоками, місцями до підстилаючої породи.

hP – 2-10 см. Бурий, щільний, брилистий, ознака засолення, пористість 20%, місцями прошарки

© Сметана О.М., Кайко Г.В., Квітко М.О.

піску, глинистий.

P – 10-20 см. Бурий, щільніше попереднього, липкий, брилистий, грудки дуже тверді, ніж залишає блискучий слід, глинистий, пористість 15%.

D – Уламки вапнякових плит.

Примітивні розвинені суглинисті ґрунти.

Розріз 3 розташований в районі смт. Широке, степова ділянка під відвалом, правий берег річки Інгулець, схил 15°, північна експозиція.

Рослинний покрив представлений: Stipa capillata L., Salvia nutans L., Centantaurea diffusa Lam., Linaria vulgaris Mill., Thymus dimorphus Klokov et Des.-Shost., Alyssum tortuosum Waldst. et Kit., Euhphorbia seguieriana Neck., Potentila incana p Gaertn., B. Mey. et Scherb.

H – 0-26 см. Темно-сірий, зернисто-порохуватий, зернисті агрегати не міцні, супіщаний, піщана фракція представлена обкатаним кварцом (продукт руйнування псамітових вапняків), густо пронизаний корінням трав, сухий, розсипчастий, каменистість 65% (вапняки в основному псамітові, зустрічаються оолітові), пористість дрібнозему 55-60%. Перехід не чіткий за щільністю та кольором.

[H/Hp] – 26-46 см. Темно-сірий з бурим відтінком, місцями до чорного, свіжий, пронизаний корінням трав, супіщаний, зернисто-порохуватий, агрегати не міцні, каменистість до 5%, піщана фракція відділяється легко. Перехід чіткий.

Hp – 46-57 см. Сірий, рихлий, переходить в щільний плитковий вапняк.

D – плитковий вапняк.

Делювіальний карбонатний супіщаний фрагментарний ґрунт. У поверхневих горизонтах ґрунтоутворення за дерновим фрагментарним типом.

Розріз 4в розміщений у північно-західній чистині відвалу «Візирка», на вапнякових насипах.

Рослинний покрив представлений: Alyssum tortuosum, Vicia cracca L., Kochia prostrata (L.) Schrad., Euhphorbia seguieriana.

Від 10% HCl бурхливо скипає по всьому профілю.

H – 0-0,5 см (місцями до 1 см). Сірий, рихлий; розсипається; сухий, пилуватий, агрегати хемогенні, пористість 60%, супіщаний, піщана фракція представлена дрібними уламками вапняків, густо пронизаний корінням трав. Перехід чіткий, по тріщинам, між уламками, каменистість 40%.

P – 0,5 см і глибше. Подрібнений вапняк, уламки від 1 до 10 см і більше, з включенням плям мергелів (щільна глиниста порода зеленого кольору); пронизаний корінням трав, але менше ніж, попередній; ходи дощових черв'яків, гнізда мурах; пористість 40%.

Примітивний карбонатний фрагментарний ґрунт.

Розріз 5в розташований у південній частині плато верхньої берми відвалу «Візирка».

Рослинний покрив представлений: Poa angustifolia, Koeleria cristata, Achillea submilifolium Klokov et Krytzka, Linaria vulgaris.

Слабо скипає по профілю.

H – 0-1 см. Чорний з бурим відтінком, сухий, рихлий, розсипається, пилувато-зернистий, зернисті агрегати фітогенні, не міцні; густо пронизаний корінням злакових трав, формується густа і міцна дернина; супіщаний, пористість 50%. Перехід в hP не чіткий, затьоками по корінню трав під куртинами, каменистість 10%.

hP – 1-7 см. Бурий з палевими плямами, помірно щільний, під куртинами рихлий, пронизаний у меншій мірі корінням трав, супіщаний, пилувато-зернистий, агрегати фітогенні, не міцні, свіжий, пористість 10-30%, перехід чіткий, каменистість 30%.

P – 7 і глибше. Бурі і палеві глини (продукти розкладу сланців та кварцитів), каменистість 40%.

Примітивний фрагментарний ґрунт, ґрунтоутворення за дерновим типом.

При аналізі просторової організації ґрунтового покриву кар'єрно-відвальних морфоструктур виявлено складне сполучення – мезокомбінацію, у якій регулярно чергуються досить крупні комплекси контрастно відмінних ґрунтів, формування яких зв'язано зі змінами мезорельєфу.

В едафічному просторі відвальних ландшафтних утворень спостерігається значна строкатість та невеликі розміри виділів на рівні елементарних ґрунтових ареалів. Тому доцільним є виділення мікрокомбінацій.

На рівні мікрокомбінацій виділяються комплекси – ґрунтові комбінації з регулярним (через декілька метрів) чергуванням дрібних плям контрастно відмінних ґрунтів, формування яких зв'язано з мікрорельєфом; мозаїки – ґрунтові комбінації з регулярним чергуванням ЕГА, формування яких пов'язано зі зміною ґрунтоутворюючих порід та ташети – аналоги мозаїк, які диференціюються крім материнських порід, також і рослинністю. В результаті аналізу були виявлені варіації примітивних розвинених глинистих ґрунтів; примітивних фрагментарних карбонатних (вапнякових) та примітивних розвинених карбонатних (вапнякових); примітивних фрагментарних та розвинених сланцево-кварцитових ґрунтів з дерновим типом ґрунтоутворення, а також примітивних нерозвинених щебенисто-глинистих сланцевих ґрунтів. Мозаїки примітивних розвинених глинистих, примітивних фрагментарних карбонатних (вапнякових), примітивних фрагментарних сланцево-кварцитових ґрунтів з дерновим типом ґрунтоутворення;

примітивних фрагментарних карбонатних (вапнякових) та сланцево-кварцитових ґрунтів з підстилковим типом ґрунтоутворення; примітивних фрагментарних карбонатних (вапнякових); сланцево-кварцитових ґрунтів зі змішаним типом ґрунтоутворення та субстратів з ознаками та без ознак ґрунтоутворення обумовлені неоднорідними за літохімічними характеристиками ґрунтотворними породами. Комплекси утворюють примітивні розвинені і фрагментарні транзитно-акумулятивні та акумулятивні ґрунти; примітивні розвинені карбонатні (вапнякові) з дерновим типом ґрунтоутворення та ксероморфні примітивні фрагментарні карбонатні ґрунти; ксероморфні примітивні фрагментарні карбонатні (вапнякові) з дерновим ґрунтоутворенням та субстрати з ознаками та без ознак ґрунтоутворення. Ташети сформовані примітивними розвиненими і фрагментарними вапняковими та сланцево-кварцитовими ґрунтами з дерновим ґрунтоутворенням під тонконоговими та тонконогово-пирійними угрупованнями та з підстилковим типом ґрунтоутворення під деревно-чагарниковою рослинністю; примітивними розвиненими сланцево-кварцитовими ґрунтами і фрагментарними вапняковими ґрунтами з дерновим ґрунтоутворенням під тонконогово-пирійними угрупованнями та з підстилковим типом ґрунтоутворення під деревно-чагарниковою рослинністю; примітивними дерновими розвиненими глинистими, примітивними дерновими фрагментарними сланцево-кварцитовими ґрунтами під пирійними та змішаними рудеральними мікрофітоценозами; примітивними розвиненими і фрагментарними вапняковими; сланцево-кварцитовими ґрунтами з дерновим ґрунтоутворенням під тонконогово-пирійними угрупованнями та з підстилковим типом ґрунтоутворення під деревно-чагарниковою рослинністю і субстратами з ознаками та без ознак ґрунтоутворення.

Нами визначено вміст, запаси та груповий склад гумусу у ґрунтах старого відвалу «Візирка»

Досліджені ґрунти мають типовий для примітивних посттехногенних ґрунтів розподіл вмісту та запасів гумусу. Верхній гумусований шар потужністю від 1 до 2-3 см, в якому вміст гумусу найвищий. Його величина в деяких розрізах більша, ніж в зональних ґрунтах (4-6% у чорноземах звичайних та південних).

В шарах ґрунту, що розташовані нижче по профілю, вміст гумусу різко зменшується і складає 0,5-3 %. Запас гумусу в цих ґрунтах складає від 13 до 70 т/га. Це пов'язано з незначною потужністю профілю молодих ґрунтів (15-30 см) і низьким вмістом гумусу у нижніх горизонтах профілю ґрунту.

Цікавими є ґрунти, розкриті розрізом 4в (табл. 1), що розташовані на вапнякових насипах висотою 1-1,5 м. В шарі ґрунту потужністю 0,5 см вміст гумусу складає 4,24 %, а нижче цей показник складає 1,15-0,60 %. Це пов'язано з ґрунтоутворюючою породою – гумусові речовини утворюють з кальцієм нерозчинні органо-мінеральні сполуки.

Вміст гумусу в ґрунті розрізу 2в (табл. 1), що розташований в западині між насипами з бурих глин, у верхніх 2 см складає 8,71 %, у шарі 2-5 см – 3,76 %, що пояснюється міграцією з насипів вниз та акумуляцією в западинах між ними мулистої фракції, з якою зв'язана органічна речовина ґрунту.

Розподіл вмісту гумусу розрізу 1в (табл. 1), розташованого в автономній позиції на вершині насипу з бурих глин, є прикладом, який наочно характеризує швидкість процесів ґрунтоутворення.

Таблиця 1. Вміст та запаси гумусу у ґрунтах старого відвалу «Візирка»

Номер розрізу	Горизонт, см	Вміст гумусу, %	σ	V, %	P, %	Запас гумусу, т/га
4в	0–0,5	4,24±0,01	0,03	0,66	0,33	2,27
	0,5–5	1,15±0,02	0,04	3,23	1,62	5,52
	5–15	0,60±0,01	0,02	3,22	1,61	5,51
Загальний запас гумусу, т/га						13,30
1в	0–2	1,75±0,01	0,02	1,17	0,59	5,14
	2–5	0,97±0,01	0,01	1,30	0,65	4,26
	5–10	1,15±0,01	0,03	2,20	1,10	8,45
	10–20	0,78±0,02	0,04	4,96	2,48	14,20
	20–30	0,63±0,01	0,01	1,93	0,96	9,70
Загальний запас гумусу, т/га						41,74
2в	0–2	8,71±0,13	0,26	2,94	1,47	29,60
	2–5	3,76±0,02	0,04	1,17	0,59	19,15
	5–10	1,40±0,01	0,03	2,01	1,00	11,90
	10–20	0,50±0,01	0,01	2,83	1,42	9,32
Загальний запас гумусу, т/га						69,97
5в	0–1	7,81±0,06	0,11	1,44	0,72	5,99
	1–7	2,27±0,02	0,03	1,54	0,77	10,46
	7 і гл.	0,95±0,01	0,01	1,18	0,59	11,02
Загальний запас гумусу, т/га						27,47
3в	0-10	5,99±0,02	0,04	0,69	0,34	41,48
	10-20	4,50±0,03	0,05	1,17	0,59	11,69
	20-30	4,90±0,01	0,03	0,56	0,28	14,06
	30-40	5,32±0,02	0,04	0,82	0,41	23,78
	40-50	4,84±0,02	0,04	0,74	0,37	16,34
Загальний запас гумусу, т/га						107,35

Груповий склад гумусу у ґрунтах, що були досліджені на верхній бермі відвалу «Візирка» також типовий для примітивних ґрунтів (табл. 2). Вміст нерозчинного залишку у ґрунтах всіх розрізів складає 70-87 %. Але спостерігається значна варіація значень відношення вуглецю гумінових кислот до вуглецю фульвокислот ($С_{ГК}$:$С_{ФК}$). Так, в розрізі 5в, що розташований в автономній позиції, у верхньому шарі (0-1 см) спостерігається гуматний тип гумусу ($С_{ГК}$:$С_{ФК}$=1,69), що, можливо, залежить від ґрунтоутворюючої породи – продуктів вивітрювання сланців та кварцитів. Нижні шари ґрунту мають фульватно-гуматний, близький до гуматного, тип гумусу. Така варіація відношення $С_{ГК}$:$С_{ФК}$ досить наближена до розподілу цього показника за профілем зональних ґрунтів.

В цілому, для молодих ґрунтів відвалу характерний фульватний та фульватно-гуматний тип гумусу. У верхніх шарах ґрунтів автономних позицій переважають гумінові кислоти, що є типовим для зональних ґрунтів. Ґрунти відвалу розвиваються за зональним типом ґрунтоутворення з поступовою диференціацією профілю. Розподіл гумусу обумовлений специфікою літооснови.

Таблиця 2. Груповий склад гумусу у ґрунтах старого відвалу «Візирка»

Номер розрізу	Горизонт, см	Загальний органічний вуглець ґрунту, %	Вуглець, % від загального органічного вуглецю ґрунту			Нерозчинний залишок, % від загального органічного вуглецю ґрунту	Сгк:Сфк
			гумінових речовин	гумінових кислот	фульво-кислот		
4в	0–0,5	2,46	18,23	6,97	11,26	81,77	0,62
	0,5–5	0,67	21,77	6,19	15,58	78,23	0,40
	5–15	0,35	15,67	4,42	11,25	84,33	0,39
2в	0–2	5,05	16,80	8,56	8,24	83,20	1,04
	2–5	2,18	18,40	7,45	10,95	81,60	0,68
	5–10	0,81	30,34	6,07	24,27	69,66	0,25
	10–20	0,29	17,38	5,09	12,29	82,62	0,41
5в	0–1	4,53	14,97	9,40	5,57	85,03	1,69
	1–7	1,32	18,10	8,90	9,20	81,90	0,97
	7 і гл.	0,55	21,48	8,66	12,82	78,52	0,68
1в	0–2	1,01	21,22	8,97	12,26	78,78	0,73
	2–5	0,56	19,31	3,62	15,69	80,69	0,23
	5–10	0,67	17,84	4,42	13,42	82,16	0,33
	10–20	0,45	17,12	4,92	12,20	82,88	0,40
	20–30	0,36	12,06	1,06	11,00	87,94	0,10

Відомо, що сольовий стан визначає трофність та фітотоксичність ґрунтів. Аналіз вмісту солей у генетичних горизонтах ґрунтів відвалу «Візирка» наведено нижче.

Примітивні важкосуглинисті ґрунти (ембріоземи автономні важкосуглинисті), які формуються на верхівках пагорбів з бурих глин в умовах автономного зволоження розкриті розрізом Р1-«Візирка» характеризуються значною потужністю профілю.

Ґрунти розрізу слабозасолені, належать за аніонами до хлоридного, за катіонами – до натрієвого типу засолення (табл. 3).

Зі збільшенням глибини в цих ґрунтах спостерігається зменшення вмісту розчинних карбонатів, іонів хлору, кальцію, суми натрію та калію, та збільшення магній-іонів (рис. 1).

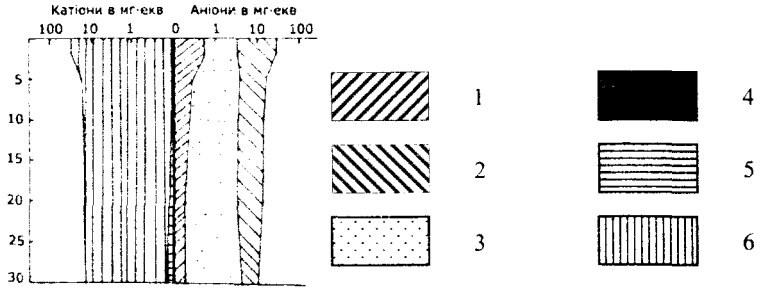


Рис. 1. Сольовий профіль примітивних важкосуглинистих ґрунтів (Р1-«Візирка»):
1 – HCO_3^-; 2 – Cl^-; 3 – SO_4^{2-}; 4 – Ca^{2+}; 5 – Mg^{2+}; 6 – Na^++K^+

Очевидно, що наявність хлориду натрію в поверхневому шарі зумовлена не стільки процесом засоленням ґрунтів, скільки значним вмістом галіту в ґрунтотворній породі та сповільненим його вимиванням з бурих глин.

Таблиця 3. Співвідношення аніонів та катіонів в ґрунтах відвалу «Візирка» (мг·екв)

Розріз	Глибина, см	За аніонами			За катіонами		
		$\frac{Cl^-}{SO_4^{2-}}$	$\frac{SO_4^{2-}}{Cl^-}$	$\frac{HCO_3^-}{Cl^- - SO_4^{2-}}$	$\frac{Na^+ + K^+}{Ca^{2+} + Mg^{2+}}$	$\frac{Ca^{2+} + Mg^{2+}}{Na^+ + K^+}$	$\frac{Mg^{2+}}{Ca^{2+}}$
Р1-»Візирка»	0-2	8,65	0,12	0,02	362,71	0,003	0,4
	2-5	3,45	0,29	0,03	186,43	0,005	0,75
	5-10	2,88	0,35	0,04	113,22	0,009	1,25
	10-20	3	0,33	0,03	100,4	0,010	2,33
	20-30	1,61	0,62	0,07	90,56	0,011	3,5
Р2-»Візирка»	0-2	0,96	1,04	-	74,71	0,013	0,75
	2-5	0,93	1,08	-	35	0,029	2
	5-10	1,14	0,88	0,53	39,5	0,025	1,4
	10-20	4,17	0,24	0,02	124,2	0,008	0,43
Р3-»Візирка» М		0,56	1,78	-	22,3	0,045	0,09
Р4-»Візирка» В	0-0,5	0,83	1,2	-	40,57	0,025	0,4
	0,5-5	0	-	-	23,83	0,042	1
	5-15	1	1	-	46,09	0,022	1,2
Р5-»Візирка» Сц+К	0-1	1,56	0,64	0,16	105	0,010	0,6
	1-7	4,41	0,23	0,04	117	0,009	1
	7 і глибше	2,42	0,41	0,04	133,5	0,007	1,67

Переважання хлоридів в поверхневому горизонті в даному розрізі зумовлено процесами засолення за рахунок нагромадження галіту. Більш цікавою є поведінка сульфатів, вміст яких збільшується вниз по профілю до 5 мг·екв. Кальцієвий буфер компенсує нагромадження сульфатів. В верхній частині профілю відбувається переведення сульфатів в гіпс. Вміст гідрокарбонатів характеризується незначним підвищенням біля поверхні, що свідчить про слабку тенденцію содового засолення.

У западинах між пагорбами з бурих глин в умовах делювіального нагромадження матеріалу та акумуляції води формуються більш багаті органікою примітивні розвинені важкосуглинисті ґрунти (ембріоземи акумулятивні важкосуглинисті), розкриті розрізом Р2-Візирка.

В цілому, це слабозасолені ґрунти. Тип засолення горизонту 0-5 см – хлоридно-сульфатний, а горизонту 5-20 см – сульфатно-хлоридний. За катіонами – це натрієвий тип засолення (табл. 3). Спостерігається нерівномірний розподіл сульфатів, катіонів натрію та магнію, а вміст кальцію та хлор-іонів збільшується з глибиною. Нагромадження солей в нижніх горизонтах відбувається внаслідок розсолення поверхневих шарів (рис. 2).

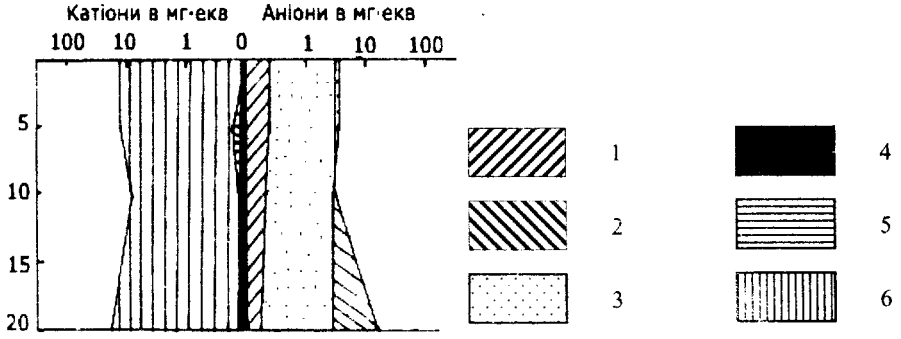


Рис. 2. Сольовий профіль примітивних розвинених важкосуглинистих ґрунтів (Р2-»Візирка»):
1 – HCO_3^-; 2 – Cl^-; 3 – SO_4^{2-}; 4 – Ca^{2+}; 5 – Mg^{2+}; 6 – Na^++K^+

Сульфатно-гідрокарбонатний фон є практично незмінним по всьому профілю. Вимивання з поверхні хлоридів та їх нагромадження в нижній частині профілю спричинене збільшеним зволоженням. Дані ґрунти поступово розсолюються.

Відомо, що товща розкривних порід у південному Криворіжжі сформована потужним чохлом осадових порід морського генезису і, зокрема, вапняків. Очевидно, що саме вапнякові шари розкривних по-

рід містять значну кількість легкорозчинних солей, які вивільняються при їх вивітрюванні. За нашими спостереженнями на нестійких до вивітрювання оолітових та мергелистих вапняках, особливо в умовах слабкого вимивання солей (на схилах південної експозиції, верхівках пагорбів тощо) ґрунтоутворення сповільнене, рослинний покрив фрагментарний збіднений, часто представлений лише мохами. Мохове ґрунтоутворення на вапняках (розріз Р3-»Візирка» М) відображує значний вміст легкорозчинних солей. Варто зазначити, що тип засолення тут хлоридно-сульфатний – натрієвий (табл. 3). Незначний вміст розчинного кальцію обумовлений надлишком сульфат-іону, який спричинює формування гіпсу.

Проте не всі вапняки характеризуються значним вмістом солей. Так, породи сарматського ярусу, представлені псамітовими вапняками зі значним вмістом кварцового матеріалу, вивітрюються повільно і вивільняють легкорозчинні солі повільно. На таких субстратах формуються слабозасолені примітивні кам'янисті ґрунти (ембріоземи автономні кам'янисті, розкриті розрізом Р4-»Візирка» В. В верхніх 0,5 см цих ґрунтів тип засолення – хлоридно-сульфатний. В наступних 5 см вміст аніонів практично відсутній через легкий гранулометричний склад субстрату, а на горизонті 5-15 см співвідношення аніонів однакове (табл. 3). В даних ґрунтах відбувається процес активного вивільнення солей на поверхні та їх вимивання вниз по профілю. З глибиною вміст розчинних карбонатів, сульфат-іонів та іонів кальцію зменшується, а іонів магнію зростає (рис. 3).

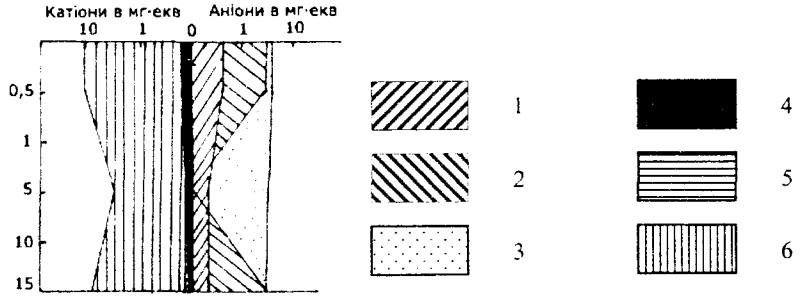


Рис. 3. Сольовий профіль примітивних кам'янистих ґрунтів (Р4-»Візирка» В):

1 – HCO_3^-; 2 – Cl^-; 3 – SO_4^{2-}; 4 - Ca^{2+}; 5 – Mg^{2+}; 6 – Na^++K^+

Сульфатний фон є постійним. Переважання хлорид-іонів відмічено у шарах 0-0,5 см та 5-15 см. В верхньому шарі ґрунту відбувається гіпергенез вапняків. В нижніх горизонтах нагромадження хлоридів обумовлене вимиванням їх з верхніх шарів ґрунту. Сульфат-іони менш здатні до руху.

Примітивні фрагментарні ґрунти автономних умов зволоження (ембріоземи автономні кам'янисті), які формуються на суміші вивітрених сланців та залізистих кварцитів, розкриті розрізом Р5-«Візирка» Сц+К, також мають незначний рівень засолення.

В аніонному складі переважають хлорид-іони, а в катіонному – іони натрію. За типом засолення ґрунти сульфатно-хлоридні – натрієві (табл. 3).

Вниз по профілю вміст розчинних карбонатів та іонів кальцію зменшується, а кількість іонів хлору, магнію та натрію – зростає, що свідчить про активне розсолення субстратів (рис. 4).

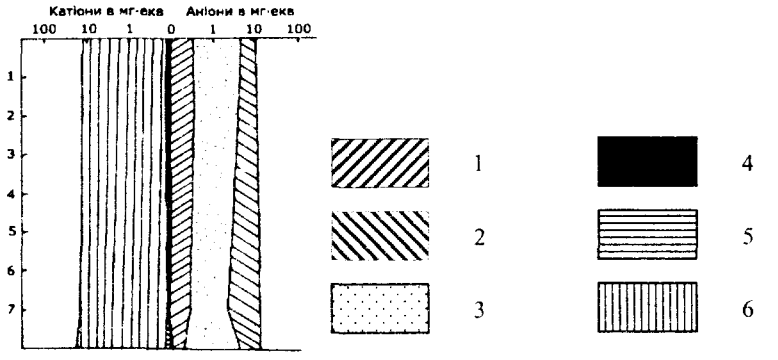


Рис. 4. Сольовий профіль примітивних фрагментарних ґрунтів (Р5-»Візирка» Сц+К):
1 – HCO_3^-; 2 – Cl^-; 3 – SO_4^{2-}; 4 – Ca^{2+}; 5 – Mg^{2+}; 6 – Na^++K^+

Вміст сульфатів знижується вниз по профілю, а з 7 см спостерігається збільшення іонів натрію та сульфат-іонів за рахунок високого вмісту мірабіліту. Вміст інших елементів по всьому профілю є постійним. В цілому вміст солей незначний, що детерміноване легким гранулометричним складом субстратів (значною каменистістю), які промиваються атмосферними опадами, за рахунок чого відбувається легке вимивання солей.

Таким чином, можна стверджувати, що ґрунтовий покрив ландшафтного заказника «Візирка» на посттехногенному кар'єрно-відвальному ландшафті, розвивається на розкривних породах, які або не є фітотоксичними, або, внаслідок процесів вивітрювання, втрачають легкорозчинні солі.

Отже, генезис ґрунтів в умовах техногенезу детермінований різноманітними чинниками. В межах відвально-кар'єрних посттехногенних ландшафтних комплексів формується надзвичайно строкатий ґрунтовий покрив з примітивних ґрунтів різного гранулометричного, мінерального складу, з різним водним режимом і різними типами ґрунтоутворення. Нами були відмічені ґрунти з водоростевим, моховим, дерновим, підстилковим типами нагромадження органічної речовини. Значну частку у структурі ґрунтового покриву посттехногенних ландшафтів мають ґрунти з фрагментарним ґрунтоутворенням (з мозаїчним типом профілю, в якому переважають крупні уламки кристалічних порід). За сольовим станом в ґрунтовому покриві відвалу «Візирка» переважають слабо засолені та незасолені різності. В елювіальних позиціях рельєфу для цих ґрунтових тіл характерне розсолення, а в акумулятивних нагромадження солей.

Аналіз сольового і гумусового стану ґрунтів техногенного відділу та ґрунтів демутаційного ряду є невід'ємним компонентом системи управління розвитком ґрунтового покриву в умовах техногенно-дестабілізованого середовища. Перспективним напрямком досліджень є виявлення структурно-генетичних характеристик ґрунтового покриву посттехногенних ландшафтів всього Криворізького залізорудного басейну.

РЕЗЮМЕ

Рассмотрено основные закономерности формирования посттехногенных почв и почвенного покрова южного Кривбасса (за В.М. Фридландом). На материале 5 репрезентативных разрезов на территории карьерно-отвального ландшафтного комплекса «Визирка» за Е.В.Аринушкиной проанализировано солевое состояние доминирующих выделов почвенного покрова. Содержание и запасы гумуса определялись по методике Орлова, групповой состав за Кононовой-Бельчиковой.

Установлено, что генезис почв в условиях техногенеза детерминирован разнообразными факторами. В пределах отвально-карьерных посттехногенных ландшафтных комплексов формируется чрезвычайно пестрый почвенный покров с примитивных почв.

Определение солевого состояния почв техногенного отдела и почв демутационного ряда является неотъемлемым компонентом системы управления развитием почвенного покрова в условиях техногенно-дестабилизированной среды.

SUMMARY

The main principles of the post-technogenic soils and Southern Kryvbass soil cover genesis are described. Using the matherials from 5 representative soil samples ("Vyzyrka" landscape complex) solt conditions of the main soil segments are analyzed (by Arinushkina). Humus condition determined by Orlov, humus groups by Kononova-Belchikova.

Soil genesis in the technogenic regions is determined by various factors. In the dumpposttechnogenic landscspe complexes vary stripped soil cover is formed.

The determination of the solt conditions in the technogenic soils and demutation soils is one of the main part of the soil cover genesis control system in technogenic-destabilized environment.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сметана М.Г. Склад і структура ґрунтового покриву ландшафтного заказника «Кобильна балка» // Роль охоронюваних природних територій у збереженні біорізноманіття: Матеріали конференції, присвяченої 75-річчю Канівського природного заповідника, м. Канів, 8-10 вересня 1998 р. – Канів, 1998. – С. 297-298.
2. Сметана М.Г., Сметана О.М., Красова О.О. Екологічна характеристика моніторингової ділянки «Пригір'я» // Вісник Криворізького технічного університету. – Вип. 5 (15). – Кривий Ріг, 2006. – С. 265-271.
3. Сметана О.М., Кайко Г.В. Територіальна структура ґрунтового покриву стаціонару Всебратське // Вісник Криворізького технічного університету. – Вип. 5 (15). – Кривий Ріг, 2006. – С. 271-276.
4. Сметана О.М., Квітко М.О. Формування біогеоценотичного покриву гранітних кар'єрів м. Кривого Рогу // Проблеми фундаментальної і прикладної екології, екологічної геології та раціонального природокористування: Матеріали Другої міжнародної науково-практичної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених. – Кривий Ріг: Видавничий дім, 2006. – 156 с.
5. Сметана О.М., Перерва В.В. Біогеоценотичний покрив ландшафтно-техногенних систем Кривбасу. – Кривий Ріг: Видавничий дім, 2007. – 247 с.
6. Назаренко І.І., Польчина С.М., Нікорич В.А. Ґрунтознавство: Підручник. – Чернівці: Книги XXI, 2004. – 400 с.
7. Аринушкина Е.В. Руководство по химическому анализу почв. – М.: Изд-во МГУ, 1970. – 488 с.
8. Орлов Д.С., Гришина Л.А., Ерошичева Н.Л. Практикум по биохимии гумуса. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1969. – 160 с.
9. Кононова М.М. Органическое вещество почвы. – М.: Изд-во МГУ, 1963. – 314 с.

Надійшла до редакції 20.11.2007 р.

УДК 577.3: 663.8-988

ИНАКТИВАЦИЯ МИКРООРГАНИЗМОВ В ЯБЛОЧНОМ ПЮРЕ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ

И.Н.Борисенко, Е.В.Ветрова, И.В.Нога, Е.Г.Панфилова, В.М.Шаталов

В последние годы в связи с развитием новой технологии стерилизации продуктов питания высоким давлением проводятся широкие исследования воздействия давления на различные биосистемы: микрофлору, витамины, ферменты и т.д. [1]. В работах [1, 2] было исследовано влияние высокого давления на инактивацию микроорганизмов и деградацию витамина С в вишневом соке. Там же в рамках кинетической модели первого порядка получены значения термодинамических параметров, определяющих константу скорости реакции как функцию давления, температуры и времени выдержки для процесса инактивации мезофильно-аэробных и факультативно-анаэробных микроорганизмов (МАФАМ), плесневелых грибов, а также для деградации витамина С. Знание этих параметров позволяет оптимизировать процесс обработки высоким давлением.

Цель настоящей работы – выяснить насколько и почему меняются при изменении среды параметры, описывающие инактивацию МАФАМ. Ответы на эти вопросы позволили бы планировать эксперимент или технологию обработки высоким давлением для неизученных объектов.

С этой целью мы исследовали влияние высокого давления на содержание микроорганизмов группы МАФАМ в яблочном пюре, приготовленном из свежих яблок непосредственно перед опытами. Обработка высоким давлением (0-600MPa) проводилась при температуре T =30°C, с выдержкой t =20min (серия 1) и при температуре T =25°C, с выдержкой t =10min (серия 2), после чего изучался количественный и качественный состав микрофлоры яблочного пюре. Для исследования были приготовлены разведения 1:10, по 1mL которых высевали на МПА. Через 5 суток подсчитывали среднее арифметическое значение количества колоний (числа КОЕ) в 1mL сока. Результаты для двух серий опытов приведены в табл. 1.

Таблица 1. Числа КОЕ в обработанных давлением образцах яблочного пюре

P, MPa	Числа КОЕ, mL-1	
	T =30°C, t =20min	T =25°C, t =10min
0	2952	5328
200		3485
300	26,7	503
400	13,3	289
500	0.01	2
600		0.02

По данным серии 1 проведен качественный анализ микрофлоры яблочного пюре, для чего были выделены чистые культуры и описаны их культуральные особенности: форма, профиль, край, размер, поверхность, консистенция, структура и цвет колоний микроорганизмов. Затем изучили морфологические особенности клеток микроорганизмов (форма клеток, наличие жгутиков, способность к спорообразованию), окрасили исследуемые микроорганизмы по Грамму, исследовали потребность в кислороде, что, в конечном итоге, позволило нам идентифицировать выделенные культуры по определителю бактерий Берджи [1].

В результате проведенной работы удалось согласно [4-3] установить принадлежность полученных культур к следующим родам: *Acetobacter, Pseudomonas, Flavobacterium, Bacillus, Zymomonas. Acidomonas*. Все перечисленные микроорганизмы были найдены в контрольном образце яблочного пюре (P=0). В образце, обработанном давлением 300MPa, обнаружено только 3 рода бактерий: *Flavobacterium, Zymomona, Acidomonas*. В образце, обработанном 400MPa, выявлен всего 1 род бактерий: *Flavobacterium*. Интересно, что обнаруженные неспорообразующие бактерии выдерживают давление 300-400MPa, а *Bacillus*, который образует споры, чувствителен к этому давлению. Причина устойчивости бактерий родов *Acidomonas*, *Zymomonas*, выдерживающих гидростатическое давление в 300MPa, на наш взгляд, лежит в том, что они принадлежат к ацидофильной микрофлоре. Стойкость *Flavobacterium* обусловлена тем, что среди бактерий этого рода есть представители экстремально-термофильной микрофлоры, а термостойкие бактерии, как правило, более компресионно устойчивы [5].

Считается, что процесс инактивации обусловлен, в основном, денатурацией белков и потому протекает как химическая реакция первого порядка [3, 4]. Для описания кинетики инактивации нам необходимо было найти предэкспоненциальный множитель A, активационный барьер реакции U_0 и изменение объема ΔV, входящие в уравнение Аррениуса для константы скорости реакции:

$$k = A\exp\left(-\frac{U_0 + P\Delta V}{RT}\right) \qquad (1)$$

© Борисенко И.Н., Ветрова Е.В., Нога И.В., Панфилова Е.Г., Шаталов В.М.

Эти параметры находились из решения методом наименьших квадратов переопределенной системы уравнений:

$$\ln(A) - \frac{1}{RT_i}U_0 - \frac{P_i}{RT_i}\Delta V = \ln\left[-\ln\left(\frac{C_i}{C_0}\right)\right] - \ln(t_i), \quad i = 1..N_{\exp} \tag{2}$$

где $N_{\exp}$ – число экспериментальных точек, для которых измерены давление P_i, температура T_i, время выдержки t_i и относительные значения чисел КОЕ C_i/C_0. Найденные значения параметров приведены в табл. 2. Как видно из таблицы, параметры для случая яблочного пюре близки к результатам, полученным в [3] для вишневого сока. Обращает на себя внимание небольшое уменьшение активационного барьера U_0 и выигрыша молярного объема – ΔV.

Таблица 2. Параметры инактивации МАФАМ

Объект	$\ln(A \cdot 1\,sec)$	U_0, kcal/mol	ΔV, mL/mol
МАФАМ в яблочном пюре	13.2	13.4	-25.1
МАФАМ в вишневом соке [3]	13.5	15.9	-35.5

На рис. 1 представлены результаты сравнения экспериментальных и расчетных относительных чисел КОЕ для случаев T =30°C, t =20min (серия 1) и T =25°C, t =10min (серия 2), полученных в настоящей работе, а также кривые, рассчитанные по данным [3] для вишневого сока. Из рисунка видно, что имеет место вполне удовлетворительное согласие теории с опытом для обеих серий. Однако в обоих случаях имеется заметный сдвиг в сторону меньших давлений (примерно на 150MPa) относительно кривых для вишневого сока. Как видно, небольшие сдвиги параметров (Табл. 2) приводят к заметным отличиям расчетных кривых, что связано с двойным потенцированием этих сдвигов.

Следует отметить, что набор параметров $\{\ln(A),\ U_0,\ \Delta V\}$ дает приближенное усредненное описание процесса инактивации целой группы микроорганизмов, существенно различающихся по чувствительности к давлению. Это возможно лишь в том случае, если в основе инактивации лежит какой-то общий для всех микроорганизмов процесс. Как мы полагаем, таким процессом является денатурация белков под давлением [3]. Процессы денатурации и выживаемость микроорганизмов в целом, при прочих равных условиях, определяются, прежде всего, кислотностью среды. Хорошо известно, что скорость инактивации микроорганизмов давлением растет с понижением pH [5]. Всвязи с этим наблюдаемый сдвиг кривых в сторону меньших давлений обусловлен, по-видимому, разными значениями кислотности в яблочном пюре (pH=5.3) и в вишневом соке (pH=6.1).

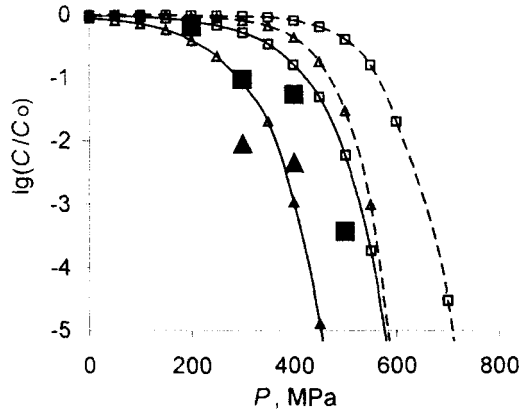


Рис. 1. Логарифм относительных чисел КОЕ в зависимости от давления P для случаев T =30°C, t =20min (▲ – эксперимент, сплошная линия с треугольниками – наш расчет, штриховая – расчет по [3]) и T =25°C, t =10min (□ – эксперимент, сплошная линия с квадратами – наш расчет, штриховая – расчет по [3])

Таким образом, мы показали, что набор параметров $\{\ln(A),\ U_0,\ \Delta V\}$, описывающих кинетику инактивации микроорганизмов, можно использовать для оценки воздействия высокого давления на микроорганизмы в разных средах, учитывая при этом изменение кислотности. Для сред с меньшими pH таким способом можно получить оценку сверху, а для сред с большими pH – оценку снизу. Величины давления 400 и 500MPa являются критическими для полной стерилизации яблочного пюре при T =30°C, t =20min и T =25°C, t =10min соответственно.

РЕЗЮМЕ

Досліджено вплив високого тиску (0-600МРа) на інактивацію мікроорганизмів в яблочному пюре. Кінетика інактивації описана у межах реакції першого порядку, отримано термодинамічні параметри, що визначають константу швидкості по Ареніусу. Показано, що цей набір можна використовувати за для оцінки впливу високого тиску на мікроорганізми у різних середовищах з урахуванням змін кислотності.

SUMMARY

High pressure (0-600MPa) processing effects on inactivation of microorganisms in pureed apple were investigated. The inactivation kinetics in the first order reaction was applied to get the thermodynamic parameters set. It was shown that the set may be used to estimate the high pressure effects on inactivation of microorganisms in different environment if the current pH is accounted.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Определитель бактерий Бердже: В 2 т. / Под ред. Хоулта Дж. и др. – М.: Мир, 1997. – 189 с.
2. Жизнь растений. Т.1. Введение. Бактерии и актиномицеты / Под ред. Н.А.Красильникова, А.А.Уранова. – М.: Просвещение, 1974. – 487 с.
3. Жизнь растений. Т.2. Грибы / Под ред. М.В. Горленко. – М.: Просвещение, 1976. – 478 с.
4. Prehoda K. E., Mooberry E. S., Markley J. L. High Pressure Effects on Protein Structure, In Protein Dynamics, Function and Design (O. Jardetzky and J.-F. Lefevre , Eds.), NATO ASI Series, Plenum Press, pp. 59-86 (1998).
5. Heremans K. High pressure effects on biomolecules // Leward D.A., Jonson D.E., Hasting A.P. (eds) High pressure Processing of Foods. – England: Nottingham Univesiti Press, 1995. – P.81-97.

Надійшла до редакції 24.04.2007 р.

УДК 581.9 (477.60) 581.5: 911.2: 581.4: 581.15

ІНТЕГРАЛЬНИЙ ПОКАЗНИК СТРУКТУРНОЇ ФІТОІНДИКАЦІЇ РІВНЯ ТОКСИЧНОГО НАВАНТАЖЕННЯ НА ПРИРОДНІ ТА ТЕХНОГЕННІ ЕКОТОПИ

А.І.Сафонов

Для біологічного моніторингу, заходів індикації стану довкілля за допомогою рослинних об'єктів та проведення екологічної ботанічної експертизи необхідною умовою опрацювання матеріалів є створення шкального градаційного критерію, що дозволяє не тільки проводити аналіз, а ще й порівнювати дані у просторі й часі, екстраполювати на подібні території [1-4].

За показниками дисбалансу необхідних та шкідливих для біоти факторів у природному середовищі Донецька область займає лідируючі позиції у Європі, що дозволяє розглядати усю територію регіону як великий своєрідний експериментальний плацдарм, де проходять етапи додаткової токсичної витривалості усіх без виключення елементів життя.

Мета цієї роботи – зведення планування та методичного виконання модельного натурного експерименту з фітоіндикаційних досліджень на південному сході України та, на основі вже накопиченого фактичного матеріалу [3, 5-7], ілюстрація приклада розрахунку інтегрального показника шкідливості довкілля.

Спосіб оцінки токсичного навантаження на природні та техногенні системи за допомогою показників структурної фітоіндикації базується на диференціальному та інтегральному підходах аналізу ступеня структурної трансформації рослин-індикаторів, що характеризуються широкою екологічною амплітудою та пластичністю в контрастних геохімічних умовах зростання за умов дії факторів специфічного та неспецифічного стресу. Інформативні фітоіндикаційні індекси відображають специфіку або сумаційний ефект токсичного навантаження на екосистеми. Запропоновано до використання 5-бальні індикаційні шкали на основі паратипової пластичності рослин природної флори південного сходу України.

Умовні етапи реалізації експерименту.

1. Рекогносцирувальний (польовий).

Результати: геоботанічні описи, картографування, флористичний список, маршрутні профілі, схема маршрутів, фотоматеріал, гербарні зразки. На цьому етапі планування дуже важливо диференціювати різні території за їх змістом, що умовно можна поділити на міські ландшафти, агроценотичні території, місця шляхів сполучення, та суто техногенні ландшафти із суттєвими порушеннями природного континууму.

2. Оглядовий (теоретико-фундаментальний).

Результати: вибір реальних об'єктів (видів рослин, що відповідають вимогам моніторингових досліджень пасивного типу), збір даних за місцевістю, аналіз можливості закладання рівномірної моніторингової сітки (бажано не менше однієї точки на 1 км^2) – в залежності від територіального розподілення об'єктів анропотехногенного або природно-техногенного характеру, що зумовлюють геохімічну гетерогенність середовища, аналіз теоретичних відомостей про стан флорокомплексів та їх трансформацію останнім часом; аналіз даних за усіма можливими природнокліматичними показниками (здебільшого місцеві карти ґрунтів, кліматичних умов, адміністративні) для планування безпосереднього місця збору зразків рослинного походження), складання бази даних щодо дії промислових та народно-господарчих об'єктів. Згідно періодів онтогенетичного перетворення видів складається календар збору рослинного матеріалу за блоками «коренева система – галуження (архітектоніка погону) – листки (різні стадії та формації) – квітки (пилок, насінини, плоди, суцвіття) – габітус – стан особини періоду плодоношення – умови формування насінного банку різних едафічних горизонтів».

3. Накопичувальний експериментальний.

Результати: колекційні та фіксовані збори матеріалу, ведення польового та первинного лабораторного щоденника, отримання індексів, адаптування шкал, збори листкових матеріалів (фіксування та гербаризація), пилкового матеріалу (фіксування), квіток, архітектоніка пагоноутворення (фотографування, гербаризація, фіксування), ґрунтові зразки, зразки будови кореневої системи, насінний матеріал, збори плодів, розрахунок системи адаптування та адаптації, реалізації життєвої стратегії, накопичення бази даних, нанесення значень на карту, можливе поповнення зборів, якщо за картосхематичною візуалізацією не утворюються закономірних переходів значень (не встановлено чіткий градієнт показників).

4. Камеральні обробки результатів.

Результати: остаточне з'ясування діапазонів значення усіх ознак, надання для кожної ознаки за кожним обраним видом рослин (пред-індикатором), окреме занотування ознак, що виходять за раніше встановлені межі пластичності (тератоморфи, атипічна будова, новоутворення, механічні порушення та ін.),

© Сафонов А.І.

детальне вивчення та підготовка ілюстративно-доказового матеріалу щодо структурної гетерогенності індикаторної ознаки, що вже встановлена як індикаторна, або, можливо, буде встановленою, на даному етапі; важливим є наочне встановлення, чи різняться ознаки з різних екотопів, якщо так, то дослід варто продовжувати. Для порівняльного аналізу необхідно отримати як мінімум 20 достовірних значень (з різних екотопів).

5. Аналітична обробка інформації.

Результати: шкали, індекси, співставлення, рівні кореляції, чисельні синтезовані значення, обов'язково – перевірка достовірності, моделювання, описові значення, системи візуалізації (площинна та в динаміці у 3-мірному зображенні), порівняння з попередніми значеннями, з'ясування можливості екстраполяції отриманих даних, висновки за отриманими даними (незалежна експертиза), співставлення із відомостями за попередніми публікаціями, що містить інформацію щодо екологічного стану природно-техногенних екосистем зони досліду.

6. Прогноз змін на певний час та подальше планування, вдосконалення методологічного блоку.

Встановленню зв'язків рослинності з окремими факторами середовища присвячено багато фітоценологічних праць, що можна пояснити широким впровадженням математичних методів, в тому числі кореляційного аналізу, який дозволяє визначити досить слабкі зв'язки на фоні випадкових відхилень [8]. Однак у багатьох випадках ставиться мета використання цих даних для побудови ординацій рослинності за градієнтом фактору, а не отримання екологічної характеристики окремих видів [1].

Динамічна аутіндикація складається з наступних положень:

1) кожний вид має свою, тільки йому властиву екологію;

2) існує ймовірна відповідність між видами та градієнтами фактору середовища;

3) наявність особин виду дає інформацію про екологію місцезростання [9].

Основним об'єктом аналізу в даному випадку є конкретний геоботанічний опис рослинності.

Більшість дослідників [10-15] вважає, що використання окремих видів-індикаторів менш перспективне, ніж оцінка середовища одразу за усім видовим складом угруповання. Але, по-перше, цей висновок базується на результатах геоботанічних, а не структурно-фізіологічних дослідів, а по-друге, детальний аналіз даних щодо варіабельності ознак будови окремого виду-індикатора з широкою екологічною амплітудою у контрастних геохімічних умовах майже відсутній [16-18].

Покрокова схема реалізації експерименту (модельний варіант за умов можливої різниці в онтогенетичних стадіях розвитку рослин, тобто відмінностей у часових характеристиках зборів):

- обрання певної території (адже саме територія є об'єктом спостереження та оцінки), наприклад, м. Донецьк;
- закладання однорідної моніторингової сітки, наприклад, один квадрат – 10 км^2;
- методом маршрутно-геоботанічного рекогносцирування засівання локалізації вузлів моніторингової сітки;
- отримання геоботанічних описів, флористичних списків, фотоматеріалів,
- із рекомендованих фітоіндикаторів (*Cichorium intybus* L., *Tripleurospermum inodorum* (L.) Sch. Bip., *Plantago major* L., *Tanacetum vulgare* L., *Reseda lutea* L., *Berteroa incana* (L.) DC. та *Echium vulgare* L. та *Tragopogon major* Jacq.) або із тих видів, що представлено в достатній кількості (понад 10 екземплярів на одну локалізовану точку збору матеріалу), утворюють спорадичні однорідні популяції та характеризуються широкою екологічною амплітудою – обирають ті, що найбільш реально відповідають місцевості аналізу (проведення оцінки);
- за умов обізнаності онтогенетичних, екологічних та біоморфологічних характеристик видів планують час збору матеріалу, наприклад, збір пилку *Cichorium intybus* – третя декада червня – друга декада липня, аналіз сферичних трихом – перша декада липня, аналіз гетерокарпічних проявів – перша та друга декади вересня;
- за спланованою схемою збирають матеріал (фіксація, гербаризація, документалізація за описовими та фотоматеріалами),
- проводять обробку результатів, див. на прикладі індексу ТР (трихоморізноманітності) – встановлений експериментально.
- Аналіз опушення листкових пластинок *Cichorium intybus* та *Plantago major* дозволив виділити декілька типів трихом, диференціювати їх за ступенем спеціалізації, або ускладненості, визначити динамічні перетворення та зміну будови трихом на поверхні листка.
- Тому постала необхідність (експериментально) виділення окремої ознаки – індексу різноманітності трихом (ТР) та подальшої перевірки інформативності ТР при тестуванні забруднення ґрунтів важкими металами, або інших факторів стресу.

- Індекс різноманітності трихом вивчали за наявністю десяти типів трихом (документально зафіксовано та апробовано типи),
- ТР встановлювали за результатами збору листкових пластинок наприкінці червня.
- Жоден із досліджених показників забруднення важкими металами не характеризувався такою специфікою варіювання окремо, тому ознака ТР в даному випадку вважається інформативною в аспекті загального техногенного навантаження в умовах посиленої антропопресії.
- Для підтвердження зробленого висновку проводиться спеціальне дослідження щодо встановлення співвідношення типів трихом *C. intybus*, що зростає у різних екотопах.
- Показник різноманітності трихом чисельно не відповідає відсотковому співвідношенню типів трихом.
- Встановлено, що незалежно від металонавантаження розподіл відсотків, що припадають на кожний із запропонованих 10 типів трихом, не має чіткої залежності, хоча окремо майже усі типи трихом корелюють з певним металом-токсикантом (або групою металів) у грунті.
- Таким чином, на прикладі показника різноманітності трихом можна констатувати, що чим дискретнішою (не комплексною) буде фітоіндикаційна ознака, тим простіше можна встановити зв'язок з певним чинником, але в такому випадку така однака є інформативною при встановленні загального рівня токсичного навантаження на середовище існування живих організмів;
- При встановленні поліморфізму листкових пластинок дуже важливо визначити гетерогенність внутрішніх тканин листка. Для цього досліджуються особливості будови дрібних жилок, навколопучкової паренхіми, анастомозної сітки, наприклад, *Cichorium intybus* та *Plantago major*.
- Рослинні збори для дослідження проводять наприкінці червня – на початку липня.
- Головною діагностичною ознакою для відмінності дрібних жилок від великих є наявність в їх складі стрижня клітин, що відносяться до імпортного періоду, та покривної мантії клітин на цьому стрижні, які формуються в період становлення експортного потоку.
- За своєю структурою та, можливо, функціями клітини дрібних жилок та периферії великих жилок не мають суттєвих різниць. Їх флоема складається з однакових клітинних комплексів. Загальна закономірність – 2-стадійний розвиток великих та 1-стадійний – дрібних жилок – полегшує їх ідентифікацію на поперечних та повздовжніх зрізах досліджуваних видів дводольних. У зрілому листку блоки флоеми розташовуються один під одним в радіальному напрямку відносно ксилеми.
- Флоемні елементи знаходяться у безпосередньому контакті з ксилемними. Увесь пучок оточується губчатою паренхімою або похідною від неї – міжпучковою. Протяжність ксилеми та флоеми у закінченнях суттєво не різниться.

Оцінку шкідливості факторів навколишнього середовища з використанням рослин та з метою інтегрального критеріального підходу адитивно проводити за 5-бальною індикаторною шкалою, за необхідністю необхідною є наявність таблиць переведення 5, 10- та 100-бальних перерахунків.

При недиференційному, тобто сумарному, підході важливим виявляється не суто наявність виду як такого на певні території, а ступінь та специфіка його структурної різноякісності, що виявляється в умовах гетерогенного середовища. Для забезпечення 100-бальної сумаційної шкали за найбільш інформативними ознаками (понад 90% ймовірності прогнозу) ми обрали наступні: ступінь дефектності пилкових зерен; індекс трихоморізноманітності, тобто ускладненості форми та будови трихом; індекси (2) матрикальної гетерокарпії та гетероспермії (задля різноплідно-насіннєвих форм); індекси (2) тератологічної синкотилії та схизкотилії; індекс деформованості термінальної флоеми листкової пластинки фітоіндикаторів; індекс аномальності анастомозної сітки листкової пластинки верхівкової формації; індекс загальної варіабельності форми пилкових зерен (за встановленими палінотипами); індекс частоти стрівальності деформованого або несформованого зародку фітоіндикаторів. Для кожного з показників індивідуально розроблено адитивну оціночну шкалу на 10 балів максимального значення в регіональних стандартах, встановлених експериментально для Донецької області, при цьому обов'язково враховано увесь діапазон структурної екологічної мінливості рослин. За умов використання 10 означених параметрів сумарний показник реакції рослин на дію факторів неспецифічного стресу сумарно буде дорівнювати інтегральному рівню та потужності факторів стресу на екологічні системи території, що аналізуються. Максимальна кількість балів за допомогою цих показників дорівнює 100, мінімальна – 10.

За апробованими методиками для різних об'єктів досліду ми рекомендуємо наступну умовну шкалу оцінювання ступеня токсичного навантаження на природні системи: 10-25 – нормальний стан екосистеми; 26-35 – допустимий, 36-75 – той, що перевищує допустимий рівень, 76-100 – недопустимий рівень дисбалансу в природних системах, що аналізуються. Якщо метод фітондикаційного моніторингу спочатку було апробовано для Артемівського та Костянтинівського промислових вузлів Донецької економічної зони, то матеріали, що аналізуються за сумаційним критерієм було впроваджено для основних забруднювачів Донецької області в цілому (міста Донецьк, Маріуполь, Авдіївка, Єнакієве, Макіївка, та ін.).

Задля визначення 5-бальності шкали оцінювання найбільш коректнішим буде використовувати зазначені 10 та 100 бальні шкали, поділяючи їх значення на 2 та 20 відповідно, тобто, за вказаними методами визначення усього спектру поліморфізму десяти індикаційних ознак сумаційний рівень та значення критеріїв при використанні запропонованої методики повинно дорівнювати відповідним даним (див. табл.).

Таблиця. Індекси відповідності переведення 5- та 100 больних шкал структурної фітоіндикації

Бал	Характеристики умов	Сума за усім спектром ознак рослин
1	сприятливі	10-25
2	нормальні	26-35
3	субнормальні	36-55
4	несприятливі	56-75
5	украй несприятливі	76-100

Просторово-часові характеристики:

- метод фітоіндикації в межах Донецької області не має відмінностей за територіальним принципом;
- час збору рослинного матеріалу обмежено у річному циклі та має свою специфіку для різних ознак індикаторних видів рослин, так, виділяють наступні періоди:
- червень-липень найбільш сприятливий та інформативний для отримання даних за ознаками ступеня дефектності пилкових зерен; індексу трихоморізноманітності, тобто ускладненості форми та будови трихом; індексу деформованості термінальної флоеми листкової пластинки фітоіндикаторів; індексу аномальності анастомозної сітки листкової пластинки верхівкової формації; індексу загальної варіабельності форми пилкових зерен (за встановленими палінотипами);
- серпень – індексу частоти стрівальності деформованого або несформованого зародку фітоіндикаторів;
- вересень-жовтень – індексів матрикальної гетерокарпії та гетероспермії (задля різноплідно-насіннєвих форм); індексів тератологічної синкотилії та схизкотилії.

Варто відзначити, що при порівнянні критеріїв оцінки самих способів фітоіндикації за вітчизняними розробками та світовими досягненнями, необхідно враховувати наступні комплексні характеристики цих способів: обґрунтованість, можливість диференціального аналізу, виявлення специфічності, коштовність методів та способів, шкідливість аналізу, можливість комплексного оцінювання, інформативність, потреба матеріального обладнання, можливість візуалізації даних, територіального розподілення, площинна залежність, ступінь комплексності, наявність регіональних стандартів, можливість впровадження при господарському плануванні використання територій, доцільність за умов природокористування, вивчення прикладних та класичних теоретичних аспектів, опанування методичного блоку, можливість шкалування, ранжування за наочними стандартами та регіональними показниками, необхідність повтору експерименту, експресивність, варіативність тлумачення, можливість провадження активного та пасивного типів моніторингів, альтернативність, можливість створення компенсаторності, можливість екстраполяції, ймовірність прогнозування, екологічність технології.

Таким чином, враховуючі зазначені принципові положення структурної індикації факторів несприятливої екологічної обстановки, що посилюють вираження гетерогенності середовища, можна планувати та впроваджувати технологію фітоіндикаційного експерименту в умовах природних та антропогенно змінених екотопів. Реакції організмів на дію факторів специфічного та неспецифічного стресу можуть різнитися за умов спрацювання консервативності або пластичності виду в залежності від його стратегічної реалізації, механізмів виживання та способів прилаштування до динамічно змінного навколишнього середовища. Подальше вивчення стратегій виживання видів у складних умовах існування дозволить наблизити дослідників до розуміння процесів життєдіяльності рослин, значною мірою поповнити свідчення про біологічний вік видів, гіпотетично аналізувати еволюційні перетворення, але ці перспективи повинні базуватися на детальному аналізі при аутекологічному диференціальному підході.

РЕЗЮМЕ

Оценку вредности факторов окружающей среды с использованием растений и с целью интегрального критериального подхода аддитивно проводить по 5-балльной индикаторной шкале. При недифференцированном подходе к оценке среды важным является не наличие вида как такового на определенной территории, а степень и специфика его структурной разнокачественности, которая проявляется в условиях гетерогенной среды.

SUMMARY

To conduct an estimation of harmfulness of the environment factors with the help of plants with the aim of integral criterial approach using a 5-mark indicator additive scale. With a differentiational approach to the environment estimation

the important thing is not the availability of a species itself on a certain territory, but the extent of and specifics of its structural heterogeneity that manifests itself in conditions of heterogenic environment.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Дідух Я.П., Плюта П.Г. Фітоіндикація екологічних факторів. – К.: Наук. думка, 1994. – 280 с.
2. Markelov D.A. Bioindication of environmental based on the scales of tolerance of plant species // XI Int. Symp. on Bioindicators «Problems of today in bioindication and biomonitoring» (Syktyvkar, 17-21 Sept., 2001). – Syktyvkar, 2001. – P. 309-310.
3. Глухов О.З., Сафонов А.І., Хижняк Н.А. Фітоіндикація металопресингу в антропогенно трансформованому середовищі. – Донецьк: Вид-во Норд-Прес, 2006. – 360 с.
4. Сафонов А.И. Индикационная ботаническая экспертиза – основа экологического мониторинга в промышленном регионе // Проблеми екології та охорони природи техногенного регіону. – Донецьк: ДонНУ, 2006. – С.19-31.
5. Глухов О.З., Хижняк Н.А., Титов А.І., Сафонов А.І. Досвід оцінки токсичності ґрунтів антропогенно трансформованих екотопів // Проблемы экологии и охраны техногенного региона. – Донецк, ДонНУ. – 2005. – № 5. – С.24-33.
6. Пат. 6648 A UA, МКИ7 A01G7/00. Спосіб проведення фітоіндикаційного моніторингу антропогенно трансформованого середовища. – А.І. Сафонов. – № 20041008609; Заявл. 22.10.04.; Опубл. 16.05.05. – Бюл. № 5. – 9 с.
7. Пат. 228148 UA, МПК A01G7/00. Спосіб оцінки токсичності середовища в умовах забруднення автомобільним транспортом. – А.І. Сафонов, П.С. Бєломеря. – № u 200613774; Заявл. 25.12.06.; Опубл. 25.04.075. – Бюл. № 5. – 8 с.
8. Ипатов В.С., Кирикова Л.А., Самойлов Ю.И. Некоторые методические аспекты построения экологических амплитуд видов // Экология. – 1974. – №1. – С. 13-23.
9. Корженевский В.В. Об одном способе интерпретации экологических шкал // Экология. – 1990. – №6. – С. 60-63. – 1996. – Т. 101, №4. – С. 69-72.
10. Викторов С.В., Востокова Е.А. Основы индикационной геоботаники.- М.: Госгеолтехиздат, 1961. – 87 с.
11. Викторов С.В., Ремезова Г.Л. Индикационная геоботаника. – М.: Изд-во Моск. гос. ун-та, 1988. – 168 с.
12. Виноградов Б.В. Растительные индикаторы и их использование при изучении природных ресурсов. – М.: Высш. шк., 1964. – 328 с.
13. Корженевський В.В., Розенберг Г.С. Застосування методів розпізнавання образів для індикації хімічних елементів ґрунту за рослинністю // Укр. ботан. журн. – 1986. – Т. 43, №2. – С. 62-65.
14. Корчагин А.А., Виноградов Б.В. Фитоиндикационные исследования в СССР // Ботан. журн. – 1967. – Т. 52, №12. – С. 1840-1846.
15. Коршиков И.И. Адаптация растений к условиям техногенно загрязненной среды. – Киев: Наук. думка, 1996. – 238 с.
16. Петрунина Н.С. Экология растений в районах с естественным обогащением почв тяжелыми металлами: Автореф. дис. ... канд. биол. наук: спец. экология 03.00.16. – М., 1965. – 20 с.
17. Петрунина Н.С. Морфолого-анатомические особенности растений, произрастающих на почвах, обогащенных тяжелыми металлами // Теоретические вопросы фитоиндикации. – Л.: Наука, 1971. – С. 142-148.
18. Вайнер Э., Вальтер Р., Ветцель Т. Биоиндикация загрязнений наземных экосистем. – М.: Мир, 1988. – 350 с.

Надійшла до редакції 07.11.2007 р.

УДК 582.632.2:581.5 (282.247.327)

СТАН ЦЕНОПОПУЛЯЦІЇ ACER PLATANOIDES L. БАЛКИ ШИРОКОЇ ЗА УМОВ РЕКРЕАЦІЙНОГО НАВАНТАЖЕННЯ

С.О.Яковлєва-Носарь,
Запорізький національний університет

Вступ

Байрачні ліси розташовані переважно в лісостеповій та північній частині степової зони [1]. Острівки балкових фітоценозів південного Степу являють собою зразок інтразонального розташування і є цінним об'єктом для всебічного наукового дослідження. Байраки Запорізького регіону належать, за О.Л. Бельгардом [2], до особливого географічного варіанта – байраків порожистої частини Дніпра. Вчені [2, 3, 4, 5, 6] приділяли значну увагу дослідженню Центрального і Східного байрачних районів, в той час як південні байрачні ліси залишалися практично не вивченими.

Як відомо, байрачні ліси мають важливе кліматичне, грунтозахисне та агротехнічне значення. Вони є своєрідним сховищем для фауни і в той же час концентраторами представників лісових, степових, лучних та інших типів фітоценозів, часто – рідких і ендемічних видів. Такі заліснені балки мають високу атрагуючу здатність для населення великих промислових міст і виступають ареною його рекреаційної активності. Внаслідок неконтрольованого антропогенного впливу байрачнолісова рослинність деградує і знаходиться на різних стадіях рекреаційної деструкції.

З метою рекомендації природоохоронних заходів необхідне детальне дослідження стану деревних і трав'яних рослин байраків. Мета нашої роботи – оцінка продуктивності ценопопуляції *Acer platanoides L.*, не характерного для південних байрачних лісів виду, за умов високого рівня антропо-рекреаційного впливу.

Матеріал і методи

Дослідження показників продуктивності ценопопуляції деревної породи *Acer platanoides L.* за умов рекреаційного пресу проводилося у байрачному лісі балки Широкої, яка розташована на острові Хортиця. Острів Хортиця входить до рекреаційної сфери міста Запоріжжя.

За лісотипологічними характеристиками байрачний ліс балки Широкої можна віднести до трофотопу типу Dn_{1-2}.

При вивченні ценопопуляції *Acer platanoides L.* за ЕДО приймалася площа всієї балки з огляду на її розміри. Була визначена просторова структура популяції даної деревної породи, проведено картування розташування особин генеративної фракції популяції та скупчень підросту. Облік чисельності та вікового стану проводили тотально на всій пробній площі, якою була балка. Для кожної особини *Acer platanoides L.* вказувався віковий стан, життєвість за восьмибальною шкалою, висота, діаметр стовбура. У рослин висотою до 3 м діаметр визначався на рівні грунту, в інших – на висоті 1,3 м. Класифікація вікових станів наведена за Т.А.Работновим [7]. Онтогенетичні спектри та просторовий тип елементарної демографічної одиниці (ЕДО) встановлено за [8, 9]. Вік ценопопуляції визначали за О.О.Урановим з використанням показника Δ та індексу δ [10], розмірну структуру – за А.С.Алексєєвим [11]. Життєвість ценопопуляції оцінювали згідно з [12], стадії рекреаційної дигресії – за [13].

Результати та їх обговорення

Біогеоценоз балки Широкої зазнає сильного антропогенного впливу, який пояснюється насамперед рекреаційною активністю відпочиваючих санаторію-профілакторію Запорізького титано-магнієвого комбінату, що розташований біля північно-західного схилу байрака. Його благоустроєна територія за допомогою сходинок пов'язана із власне байрачним лісом. Окрім транзитного типу рекреаційної діяльності насадження балки піддається бівуачній та добувальній формам відпочинку.

За комплексом ознак фітоценоз балки Широкої є похідним бересто-пакленового типу лісу, який характеризується відсутністю у деревостані *Fraxinus excelsior L.*, *Acer campestre L.* та наявністю *Acer platanoides L.* і *Sambucus nigra L.*

Як вказує О.Л. Бельгард [2], взагалі для дендрофлори байраків порожистої частини Дніпра характерною є відсутність як *Ulmus scabra Mill.*, так і *Acer platanoides L.* Але, за нашими даними, у формуванні II-го ярусу байрачного лісу балки Широкої бере участь саме *Acer platanoides.* Чисельність його популяції у даній балці налічує 214 екземплярів, що складає 21,1 % деревостою. Сукупність особин *A. platanoides* має III бонітет

Концентрація особин *A. platanoides* різних вікових станів відзначається, головним чином, на північно-західному схилі балки та в прилеглих до нього ділянках тальвегу. Підріст розташовується групами, неподалік від материнських дерев.

© Яковлєва-Носарь С.О.

Як зазначає О.В. Смірнова [8], онтогенез тіньовитривалих видів роду *Acer* можливий у вікнах середнього розміру (200 – 600 м^2). Іматурні локуси *A. platanoides* можуть розвиватися на площі 20 м^2, віргінільні – на 70-100 м^2, генеративні – 400-500 м^2. Мінімальна площа ЕДО в цілому становить 1,1-1,8 га. Загальна ж площа байрака складає близько 2 га, тобто територіальна складова не є перешкодою для реалізації потоку поколінь даного виду. Успішність природного поновлення *A. platanoides* зумовлюється низкою чинників, у тому числі регулярним поповненням популяції молодими особинами завдяки практично щорічному плодоношенню [14] та досить вираженою тіньовитривалістю. Так, відомо, що гостроклені насадження належать до тіньової структури. Більш того, переважна кількість видів кленів у фітоценозах росте у II-му ярусі. Ця їх особливість склалася в процесі філогенезу [15].

Оптимальними умовами для росту самосіву даної деревної породи є свіжі, стійко зволожені ґрунти і намет рідин [16]. А дослідження, проведені авторами [17] у Велико-Анадольському масиві свідчать про більшу кількість самосіву *A. platanoides* у насадженнях тіньової структури порівняно з напівтіньовою і напівосвітленою (в тис. шт/га, відповідно): 20; 5 і 2. На стійкість самосіву *A. platanoides* під наметом зімкнутого насадження вказує й А.Д.Букштинов [18].

Дійсно, самосів *A. platanoides* балки Широкої знаходиться поблизу материнських особин, які не перешкоджають приживанню і нормальному розвитку молодих рослин цього виду. Така картина розташування поновлення характерна для асектаторів. Як теоретичний, так і одержаний нами для ценопопуляції *A. platanoides* балки Широкої просторовий тип ЕДО є дифузним. Це характеризує популяцію вивчаємого виду як таку, що знаходиться у досить стійкому стані.

У толерантних видів деревних рослин (патієнтів), до яких належать види роду Acer, окрім абсолютного максимуму в прегенеративно-молодій генеративній частині базового спектра, може бути додатковий пік, пов'язаний із середньовіковими генеративними особинами [19]. Проте, в нашому випадку реальний віковий спектр має два максимуми у прегенеративній фракції ценопопуляції (рис. 1). Наявність піку чисельності ювенільного вікового стану є передбачуваним. Що ж стосується віргінільної вікової групи, то слід зазначити її різнорідність. До цієї групи входять особини широкого вікового діапазону: від 3 – 4-річних до 10 – 15-річних, тобто ніби спрацьовує ефект «кумуляції» особин.

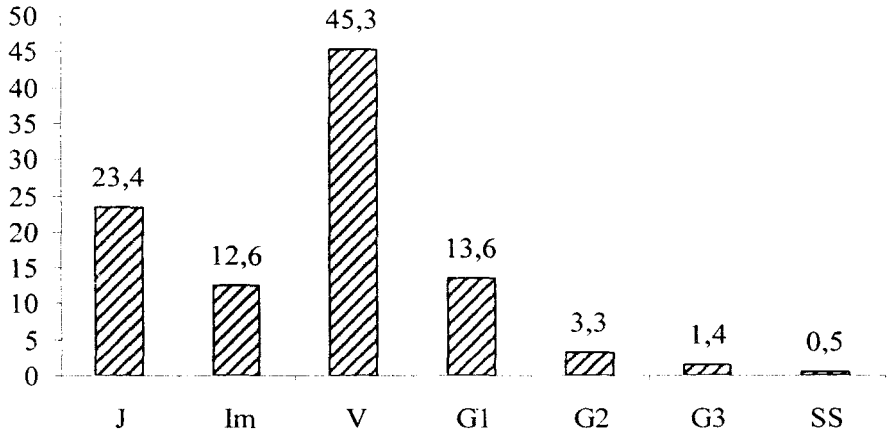


Рис. 1. Віковий спектр ценопопуляції *A. platanoides* у балці Широкій: OX – вікові стани, OY – зустрічальність у %

Наші спостереження проводилися восени. А для ряду видів кленів (*A. platanoides, A. pseudoplatanus, A. monspessulanum subsp. ibericum* та ін.) характерним є те, що з одного врожаю насіння виростають сходи двох вікових категорій – осінні (вважаються за однорічні) і весняні (вважаються за дворічні) [15]. Тому, на наш погляд, осінні сходи року спостереження складають ювенільну вікову групу. А іматурними рослинами *A. platanoides* є весняні сходи цього року й осінні – попереднього і більш ранніх років.

Відсутність другого піку чисельності у генеративній частині спектра пояснюється нами погіршенням умов для реалізації потоку поколінь *A. platanoides* у балці Широкій близько 10-20 років тому. Точніше цей період вказати важко, бо, за одними літературними джерелами досліджувана деревна порода починає плодоносити у віці 10 років (на півдні навіть у 5 років) [18], за іншими – у 13-20 років [20].

Отже, популяція *A. platanoides* у байрачному лісі балки Широкої є повночленною і має бімодальний реальний спектр з реалізовуваним потоком поколінь.

Нами розрахований показник віку (Δ) для ценопопуляції *A. platanoides* балки Широкої. Він становить 0,13, що свідчить про переважання у популяції молодих особин. Оцінка вікового рівня популяції *A.*

platanoides у вивчаємому байрачному лісі за індексом δ [21] дала величину (–0,90), що свідчить про переважання молодих особин у популяції, але в цілому позитивно характеризує її статус.

Розмірні спектри за діаметром стовбура як для особин прегенеративної частини популяції, так і генеративної фракції мають несиметричний бімодальний розподіл з переважанням особин малих розмірів (рис. 2).

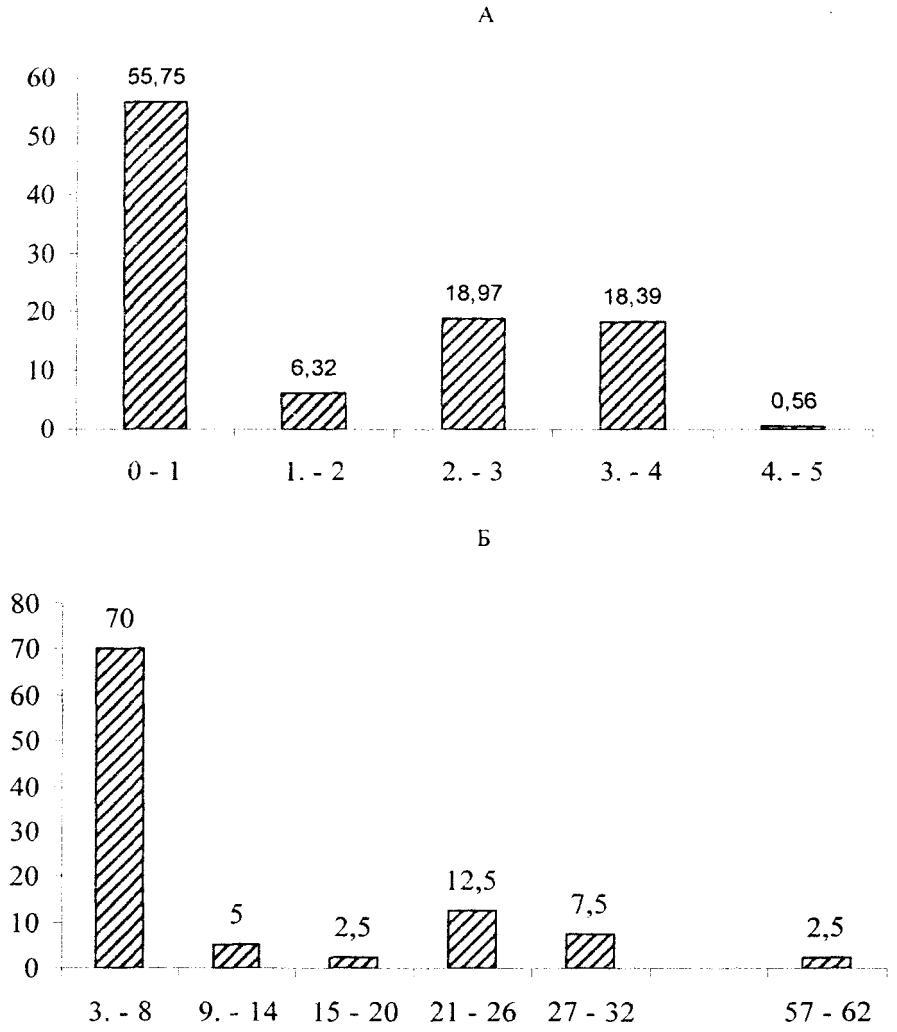


Рис. 2. Розмірний спектр ценопопуляції *A. platanoides* у балці Широкій для особин прегенеративної фракції (А) за діаметром стовбура на рівні ґрунту і генеративних особин (Б) за діаметром стовбура на висоті 1,3 м: ОХ – границі класів, ОУ – зустрічальність у %

Як видно з рис. 3, розподіл молодих особин ценопопуляції *A. platanoides* за розмірними класами висоти має також бімодальний характер з деяким переважанням особин відносно крупних розмірів (у даному випадку висотою 2-4 м). Відомо, що *A. platanoides*, особливо у першому десятиріччі свого розвитку, належить до швидкорослих порід. Його щорічний приріст у висоту на кращих ґрунтах досягає 1 – 1,5 м [18]. За даними І.Ф.Гриценко [22], в умовах степової зони України *A. platanoides* у віці 5 років в середньому досягає висоти 2,2 м, а 10 років – 4,3 м. А.Д.Букштинов [18] наводить такі величини висоти стовбура даної деревної породи насіннєвого походження на південних чорноземах: 3 роки – 1,2 м (і далі, відповідно), 5 – 2, 2; 10 – 4,1; 15 – 5,6; 20 – 7,0; а 25 років – 8,3 м.

Для дерев генеративної фракції популяції властивий логістичний ріст з наявністю тільки одного максимуму. З цього витікає, що перед нами досить різновікові деревостани, але з переважанням поколінь висхідного ряду. І в літературі є дані, що ценопопуляції *A. platanoides* розвиваються до дефинитивного (рівноважного) стану при постійному переважанні молодих рослин [23].

Аналіз розмірних спектрів *A. platanoides* за допомогою оцінки асиметрії показує накопичення порівняно мілких рослин, тобто свідчить про доволі успішне насіннєве поновлення даної деревної породи в умовах байрачного лісу балки Широкої.

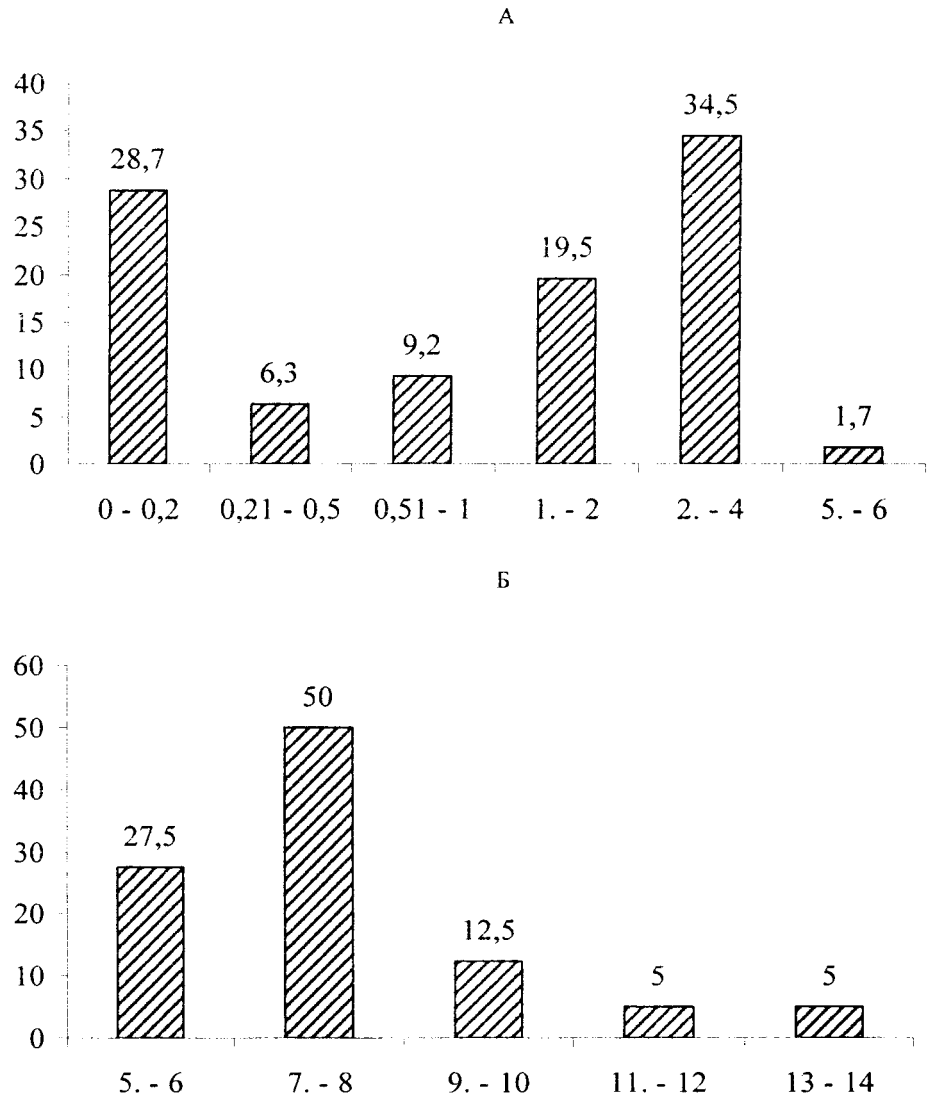


Рис. 3. Розмірні спектри ценопопуляції *A. platanoides* балки Широкої за висотою (м) для особин прегенеративної (А) і генеративної фракцій (Б): ОХ – границі класів, ОУ – зустрічальність у %

Відомо, що життєвість є важливим показником продуктивності популяції рослин. З табл. 1 видно, що всі фракції ценопопуляції *A. platanoides* мають доволі високі середні бали життєвості. Найбільшу зустрічальність при характеристиці прегенеративного і генеративного вікових періодів мають найвищі бали від 6 до 8.

Таблиця 1. Життєвість особин *A. platanoides* ценопопуляції балки Широкої

Віковий період	Зустрічальність у % показника життєвості								Середній бал
	1	2	3	4	5	6	7	8	
Прегенеративний	–	–	–	2,9	9,8	18,4	45,9	22,9	6,8
Генеративний	–	–	–	–	2,6	10,3	58,9	28,2	7,1
Постгенеративний	–	–	–	–	–	100,0	–	–	6,0

Зниження показника життєвості окремих особин прегенеративної фракції визначали такі чинники: механічні пошкодження антропогенного характеру (в екз. і відсотках від загальної кількості особин цього вікового періоду) – 10 екз. (5,7 %); ушкодження листкогризами – 3 екз. (1,7 %); хвороби: чорноплямистість листків клена – 7 екз. (4,0 %); борошниста роса – 5 екз. (2,9 %); а також всихання гілок – 1 екз. (0,6 %). Загальна чисельність особин прегенеративної фракції ценопопуляції *A. platanoides*, в яких нами зареєстровані пошкодження будь-якого походження та ураження хворобами, склала 26 екз., або 14,9 % від числа особин даного вікового періоду. Серед представників генеративної частини популяції відзначено 8

екз. (20,5 % від кількості представників вікової групи) з ураженням чорноплямистістю листків та 1 екз. (2,6 %) – з сухими гілками.

Таким чином, популяція *A. platanoides* має достатню продуктивність і досить добрий санітарний стан.

Необхідно зазначити, що 7,7 % (3 екз.) особин генеративного вікового періоду є багатостовбурними, і така ж кількість особин – утворюють порість. Здатність давати порість у *A. platanoides* зберігається до 40 – 50 років [18].

В цілому, порівняно з ценопопуляцією *Quercus robur L.* балки Широкої, популяція *A. platanoides* має типовий для даного виду варіант ЕДО, реалізовуваний потік поколінь з переважанням особин висхідного ряду. Оцінка продуктивності популяції *A. platanoides* за показниками віку (Δ, δ) також вказує на великий внесок її молодої складової. Проте, аналіз параметрів життєвості особин всіх вікових періодів дає змогу позитивно оцінювати продукційний процес ценопопуляції в цілому.

У статті [25] нами досліджений стан ценопопуляції *Quercus robur L.* балки Широкої, де сукупність особин цього виду становить 31,3 % деревостану. З позиції конкуренції, за висновками низки авторів [22, 24, 18], *A. platanoides* є одним з кращих і зовсім безпечних тіньових супутників для *Q. robur* на звичайних чорноземах. Але А.Д. Букштинов [18] підкреслює, що в густих насадженнях *A. platanoides* гальмує ріст *Q. robur*, тому при створенні або реконструкції деревних фітоценозів бажана відстань між представниками цих видів не менше 2,5 – 3 м.

Висновки

1. Байрачний ліс балки Широкої піддається сильному антропогенному впливові й знаходиться на III-й стадії рекреаційної дигресії. Деякі ділянки цього природного комплексу мають ознаки IV-ї стадії деградації.
2. У фітоценозі балки Широкої популяція *A. platanoides* має дифузний тип будови ЕДО.
3. Встановлено, що популяція *A. platanoides* у байраці Широкому є повночленною, має бімодальний реальний спектр, з реалізовуваним потоком поколінь. Як прегенеративна, так і генеративна фракції популяції мають досить добрий санітарний стан.
4. Розмірні спектри за діаметром стовбура і висотою демонструють переважання особин висхідного ряду, але в цілому досить сприятливо характеризують популяцію *A. platanoides* балки Широкої. Популяція має риси позитивної асиметрії, що свідчить про успішне насіннєве відновлення вивчаємої деревної породи.
5. Оцінка продуктивності ценопопуляції *A. platanoides* за показниками віку (Δ, δ) та рівнем життєвості характеризує продукційний процес вивчаємого виду в балці Широкій як достатній. Переважання молодих рослин розглядається як норма існування природних ценопопуляцій *A. platanoides*.

Перспективними є дослідження стану і продуктивності ценотичних популяцій видів байрачнолісової флори балки Широкої.

РЕЗЮМЕ

Исследованы морфометрические характеристики особей Acer platanoides L. разных возрастных состояний, выявлены онтогенетический спектр, пространственный тип ЭДЕ, возрастность популяции (показатели Δ, δ), размерная структура по диаметру ствола и высоте, уровень жизненности в байрачном лесу Запорожской области. Установлен достаточный уровень продукционного процесса Acer platanoides L. в балке Широкой, произведена оценка стадии рекреационной деградации фитоценоза.

SUMMARY

Morphological descriptions of individuals Acer platanoides L. different age states are explored, ontogenetic spectrums are ascertained the spatial type EDU age of cenopopulation (the P, S parameters), size spectrums on the diameter of trunks and on a height, indexes of vitality in typical ravine forests of the Zaporozhian region. Satisfactory productivity of A. platanoides population is diagnosed in the ravine Shirokaya, the estimation of a stage of recreational degradation of the phytocenosis.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Українська енциклопедія лісівництва / Під ред. С.А. Генсірука. – Львів, 1999. – Т. 1. – С. 43.
2. Бельгард А.Л. Лесная растительность юго-востока УССР. – К.: КГУ, 1950. – 264 с.
3. Пятницкий С.С., Изюмский П.П. Леса Украинской ССР // Леса СССР: в 3-х т. – М.: Лесн. пром-сть, 1966. – Т.3. – С.195-218.
4. Генов А.П. Вплив умов місцезростання на продуктивність і структуру фітомаси байрачних лісів Старобільщини // Укр. ботан. журн. – 1977. – Т. 34, № 1. – С. 67-70.

5. Поташев Ю.Н., Скрипник И.А., Галив М.А. Почвенно-типологические особенности байрачных лесов Днепропетровщины // Восстановление лесных экосистем: Сб. науч. тр. – Харьков: Харьков. с.-х. ин-т им. В.В. Докучаева, 1989. - С. 30-39.
6. Дядько В.Н. Байрак «Войсковое» как объект рекреационного использования // Биогеоцен. исслед. лесов техноген. ландшафтов степной Украины. – Межвуз. сб. науч. тр. – Днепропетровск: ДГУ, 1989. – С.120-125.
7. Работнов Т.А. Определение возрастных состояний популяций видов в сообществах // Полевая геоботаника. – Т.3. – М.-Л., 1964. – С.132-145.
8. Смирнова О.В. Популяционная организация биоценотического покрова лесных ландшафтов // Успехи совр. биол. – 1998. – Т. 118, вып. 2. – С.148-165.
9. Смирнова О.В., Заугольнова Л.Б., Попадюк Р.В. Популяционная концепция в биогеоценологии // Журн. общ. биол. – 1993. – Т. 54, № 34. – С.438-448.
10. Уранов А.А. Возрастной спектр фитоценопопуляции как функция времени и энергетических волновых процессов // Биол. науки. – 1975. – № 2. – С.7-33.
11. Алексеев А.С. Размерная структура популяции древесных растений – основные типы, механизм формирования и использование в теоретическом популяционном анализе // Журн. общ. биол. – 1993. – Т. 54, № 4. – С.449-461.
12. Ермакова Н.М. Жизненность ценопопуляций и методы ее определения // Ценопопуляции растений (основные понятия и структура). – М.: Наука, 1976. – С.92-105.
13. Карписонова Р.А. Дубравы лесопарковой зоны г. Москвы. – М.: Наука, 1967. – 103 с.
14. Смирнова О.В., Чистякова А.А., Попадюк Р.В. Популяционные механизмы динамики лесных ценозов // Биол. науки. – 1989. – № 11. – С. 48-58.
15. Кохно Н.А. Клены Украины. – К.: Наук. думка, 1982. – 184 с.
16. Кулагин Ю.З., Мушинская Н.И. О критических периодах в семенном размножении клена платановидного (Acer platanoides L.) // Экология. – 1984. – № 3. – С. 12-16.
17. Акимова Н.П., Тараненко В.Е. К вопросу об естественном семенном возобновлении в Велико-Анадоле // Велико-Анадольский лес: Матер. работ компл. экспед. ДГУ. – Харьков: ХГУ, 1955. – С. 121-128.
18. Букштынов А.Д. Клен. – М.: Лесн. пром-сть, 1982. – 86 с.
19. Чистякова А.А. Структурно-динамические аспекты устойчивости популяций лиственных деревьев // Журн. общ. биол. – 1994. – Т. 55, № 4 – 5. – С. 564-572.
20. Справочник лесовода / Под ред. П.С. Пастернака. – К.: Урожай, 1990. – 296 с.
21. Жукова Л.А. Изменение возрастного состава популяций луговика дернистого под влиянием выпаса // Биол. науки. – 1967. – № 8.
22. Гриценко И.Ф. Выращивание дуба в черноземной степи. – М.: Сельхозгиз, 1953. – 56 с.
23. Ценопопуляции растений (очерки популяционной биологии) / Л.Б.Заугольнова, Л.А.Жукова, А.С.Комаров и др. – М.: Наука, 1988. – 184 с.
24. Логгинов Б.И. Особенности культур дуба в степной зоне УССР // Лесовод. и агролесомелиор. – К.: Урожай, – 1970. – Вып. 20. – С. 46-50.
25. Яковлєва-Носарь С.О. Стан ценопопуляції Quercus robur L. балки Широкої за умов рекреаційного навантаження // Питання біоіндикації та екології. – 2007. – Вип. 12, № 1. – С. 10-24.

Надійшла до редакції 08.10.2007 р.

УДК 599. 742. 1: [591. 53. 063: 591. 526] (477. 5/7)

ПИЩЕВОЕ ПОВЕДЕНИЕ ВОЛКА ПРИ УВЕЛИЧЕНИИ ЕГО ЧИСЛЕННОСТИ В АНТРОПОГЕННЫХ ЛАНДШАФТАХ ЮГО-ВОСТОКА УКРАИНЫ

В.И.Домнич, И.А.Смирнова, В.Е.Вовченко,
Запорожский национальный университет

Введение

Юго-восток Украины следует отнести к территориям с сильнейшей антропогенной нагрузкой. В первую очередь благодаря значительной открытости угодий со слабыми защитными условиями, и доминирующему количеству территорий преобразованных деятельностью человека [1; 2]. Большой запас источников кормов антропогенного характера, обуславливает формирование новых экологических форм волка (Canis Lupus), в связи с этим, эволюционно сложившаяся пищевая специализация вида смещается в сторону использования синантропных объектов [3].

Неоднозначная оценка существования популяции Canis lupus колеблется от крайне отрицательной [4], до более лояльной [5]. Особенно актуальным вопрос отношения к хищнику на Украине стал в последние годы, в связи с увеличением его численности с 1973 (431 ос.) до 2005 г. (2543 ос.), почти в 6 раз. О высокой плотности популяции волка свидетельствуют участившиеся случаи нападения бешенных животных на людей. Нам известны 17 случаев в Запорожской, Харьковской и Херсонской за период 2004-2006 гг.

Слабая изученность трофических связей волка при значительном увеличении его численности в антропогенных ландшафтах, даёт основание предположить факт синантропизации пищевого поведения вида, что послужило выбором направления наших исследований.

Материалы и методы

Исследования, определяющие степень изменения рациона волка юго-востока Украины, проводились на территории Донецкой, Луганской, Днепропетровской, Запорожской, Харьковской и Херсонской областей, в летний (июль – август) и зимний периоды (ноябрь – февраль) 1998-2006 гг. Всего было обследовано 43 желудка Canis lupus. Нами использованы методики В.Ф.Гаврина, С.С.Донаурова [6], В.Г.Юдина [7] по исследованию содержимого желудков хищных млекопитающих, с нашими дополнениями. Для чего была определёна видовая принадлежность каждого фрагмента входящего в состав пищевого рациона волка. При анализе учитывалась масса, а также количественное и процентное отношение встречаемости различных видов кормов в пищевом рационе волка.

Так же нами проводился анализ экскрементов и выяснение охотничьих повадок вида Canis lupus связанных с кормодобыванием на территории Кинбурнской косы Николаевской области в 2003-2004 гг.

Для более полной информации, нами разработаны анкеты по определению экологических особенностей волка, в том числе его пищевой специализации. Респонденты, отвечавшие на вопросы, были представлены работниками лесного хозяйства и опытными охотниками, которые участвуют в мероприятиях направленных на снижение численности волка в различных областях юго-востока Украины. Всего было получено 34 анкеты. Оценка количественных показателей численности волка на Украине проводилась по данным Комитета лесного хозяйства Украины.

Результаты и обсуждение

Пищевой рацион волка населяющего различные географические районы, отличается значительной вариабельностью [8]. В результате анализа остатков пищи в желудках хищника, обитающего на юго-востоке Украины, было определено, что в рацион, входят 14 компонентов (табл.1). Наибольшее значение приходится на долю домашних животных, среди которых были обнаружены, собака домашняя (Canis lupus familiaris) 20,7%, свинья домашняя (Sus scropha s.) 12,1%, корова (Bos taurus) 3,4%, утка домашняя 1,7%, а также курица домашняя (Gallus gallus g.) 1,7%.

Из представителей дикой фауны в пищевом рационе волка были встречены: заяц-русак (Lepus timidulus) – 12,1%, и мышевидные грызуны (Mus domestikus) – 12,1%, енотовидная собака (Nyctereutes procyonoides) – 3,4%, лиса (Vulpes vulpes) – 1,7%.

Отметим, что все животные компоненты (собака, свинья, КРС, заяц-русак и мышевидные грызуны) в отдельных случаях составляли 100% содержимого 1 желудка (табл. 1: столб. 4-6).

Травянистая растительность и плодово-ягодные культуры присутствовала в желудках хищников в 12 случаях. Крайне малое количество растительных остатков (всего 0,21% от общего веса), даёт основание полагать, что растительность попала в пищеварительный тракт непроизвольно вместе с основным видом поедаемого корма. Исключение составили две особи волка, в желудках у которых были обнару-

© Домнич В.И., Смирнова И.А., Вовченко В.Е.

жены семена подсолнечника (январь-февраль 2006 г.). В одном случае содержание подсолнечника было довольно значительным и составляло 88,6% содержимого (табл. 1). При осмотре содержимого желудка волка, добытого в летний период (конец 90-х гг.) на территории Акимовского района Запорожской области, нами были обнаружены семена арбуза (18% от содержимого). Отметим, что в указанном районе хорошо развито бахчеводство. Кроме этого в Херсонской области на территории Гавриловского ГЛОХ, по устному сообщению директора Н. Швыдкого, в 2005 г. был зафиксирован случай поедания волком значительного количества арбузов, когда стая из 6 ос. (2 ad и 4 juv) испортила значительный участок бахчи. Арбузы волки переносили на соседнее кукурузное поле, где егерями, выехавшими по требованию фермеров, были обнаружены 2 участка (10×16м и 8×4 м) со значительным количеством плодов (более 60 шт.) выгрызенных хищниками.

Таблица 1. Количественные и весовые показатели содержимого желудков волка (n=39) на юго-востоке Украины 1998-2006 гг.

Виды	Общая частота встреч		% от веса содержимого 1го желудка		
	n	%	min	max	M
1	2	3	4	5	6
домашние животные	**24**	**41,3**			
собака домашняя	12	20,7	9,6	100	79
свинья домашняя	7	12,1	2,1	100	43,4
КРС	2	3,4	44,4	100	72,2
утка домашняя	1	1,7		15	-
курица домашняя	1	1,7	-	44	-
стержни пера	1	1,7	-	4,3	-
дикие животные	**17**	**29,3**			
заяц – русак	7	12,1	8	100	62,4
мышевидные грызуны	7	12,1	1,6	100	67,2
лиса	1	1,7	-	28	-
енотовидная собака	2	3,4	-	30	-
растительные корма	**5**	**8,6**			
семечки подсол.	3	5,2	4,1	88,6	46,4
плодово-ягодные	2	3,4	2,7	18	10,3
случайные корма	**9**	**15,5**			
травянистая растительность	7	12,1	0,1	6	2,4
инородные тела	2	3,4	-	1,7	-
неопределённые останки животного происхождения	**3**	**5,2**	-	75,6	-

Инородные тела были встречены 2 раза, они были представлены целлофаном, тканью и бумагой (общий вес 7,4 г). Желудки 4 волков (9,3%) характеризовались полным отсутствием содержимого. Для популяции C.Lupus обитающего в Латвии, был отмечен более высокий процент пустых желудков (37%) [9].

Определённый интерес представляют показатели содержания свиньи домашней в содержимом желудка волка. Если в рационе хищника, обитающего на юге Украины и в Молдавии, в середине – конце XX ст., этот вид был встречен 7,2% [10; 11], то 2005-2006 гг. предпочитаемость увеличилась на 4,9% (до 12,1%). Следует отметить, что при фактическом количестве встреч равном для зайца (n=7) и мышевидных грызунов (n= 7), среднее отношение веса к общей массе содержимого желудка меньше (43,4%; 62,4%; 67,2%, соответственно) (табл. 1: столб. 6). Таким образом, наблюдаемые низкие показатели среднего веса к общей массе содержимого желудка, по сравнению с другими пищевыми компонентами, позволяют предположить, что этот вид корма для хищника не является предпочитаемым. И.Г.Гурский [10] отмечал, что при наличии выбора объектов питания волк избегает мяса свиньи. Возможно, что даже при недостаточном количестве пищевых ресурсов, этот вид корма не является для хищника приоритетным.

Особо отметим, что волк активно питается на скотомогильниках, о чём свидетельствует характер повреждения останков сельскохозяйственных животных обнаруженных в желудке хищников. Так исследуя содержимое желудка самки добытой в Запорожской области (январь 2006), были обнаружены ровно обрезанные перья, предположительно – курицы, которые составили 4,3% от общего веса содержимого желудка

(табл. 1). Останки курицы обнаруженные в другом желудке волка добытого в феврале 2006 г., были представлены шкурой с перьями и мелкими осколками костей. Тот факт, что на перьях был слой грязи, а также наличие личинок мух, дало основание предположить, что птица была отрыта из земли, скорее всего со «скотомогильника». В останках свиньи и коровы преобладали куски их шкуры и шерсти. Шкура свиньи домашней, имела ровно резаные края, на коже были обнаружены следы от режущих поверхностей (возможно царапины от ножа). Интересным является и тот факт, что среди перечисленных выше объектов питания, отсутствовали внутренние органы и мышечная ткань. Костная ткань только в некоторых случаях была представлена небольшим количеством. Значительное количество мышечной ткани телёнка наблюдался всего один раз, когда этот вид корма составлял 100% содержимого желудка. Согласно нашим наблюдениям поздней осенью на территории Кинбурнской косы, волк в первую очередь, поедает мышечную ткань, а кожу с шерстью хищники не трогали на протяжении 2-3 месяцев.

По данным И.Г.Гурского в середине-конце XX ст. (1945-1981), соотношение диких и домашних животных в зимнем рационе хищника на юге Украины (ноябрь-март), составляло 10,8 и 87,9%, соответственно. При этом 40,6% из числа останков относящихся к домашним животным приходилось на падаль [10]. Отметим, что в начале – середине 80-х гг. численность волка на юго-востоке Украины была в 11 раз меньше нынешней (103-195 ос. в 1980, 1983 гг.; 1167 ос. в 2003 г.). Согласно наших данным, по исследованию содержимого желудков волка, в зимний период 2005-2006 гг., процентное содержание диких животных, составило 29,3%, а домашних 41,4%. Важно то, что все сельскохозяйственные виды (свинья, корова и курица) были добыты в виде падали и её соотношение к общей встречаемости домашних животных составляло 45,8%. Однако ещё 3-4 года назад, И.Н.Шейгас [12] отмечал, что в рационе волка, обитающего на территории Херсонской области, доминировали дикие животные. Они составляли 81% рациона, а совокупность сельскохозяйственных видов, падали и растительных остатков составляли всего 19%.

Значительное содержание диких копытных в пищевом рационе волка наблюдается на территориях покрытых лесом. Например, в Эстонии этот компонент составляет 79,5 % (из которых 50,9% приходится на долю косули Capreolus capreolus) [9; 13]. В украинском Полесье косуля, лось и кабан, по данным А.Сагайдак, М.Шквыри [14], также имеют большое значение. На юго-востоке Украины нами эти виды на данный момент, обнаружены не были. Но большинство респондентов отмечает, что косуля и кабан присутствуют в рационе волка (n=20, n=12, соответственно).

В середине – конце XX ст. на территории СССР было большое количество колхозов, совхозов, различных животноводческих объектов, что в свою очередь обуславливало значительный отход с/х животных. По данным исследователей того времени [3; 15], скотомогильники не соответствовали санитарным нормам, что позволяло диким животным беспрепятственно питаться падалью. В настоящее время, нами лично, неоднократно были отмечены случаи, когда домашних животных погибших от инфекционных заболеваний, нерадивые хозяева вывозят за переделы населённых пунктов и выбрасывают в придорожные посадки, балки. Создавая, таким образом не только источник корма для различных хищников, в том числе и волка, но так же способствуя ухудшению эпизоотологической ситуации.

При сравнении наших результатов с исследованиями И.Г.Гурского [11] отмечаем значительное увеличение процента встречаемости собаки домашней и диких животных. Увеличение количества останков диких животных в рационе волка, на фоне общего снижения их численности, на наш взгляд связано со снижением поголовья с/х в последние 10-15 лет, в результате распада значительного количества крупных животноводческих объектов (колхозов, совхозов). Мы считаем, что вследствие вышеперечисленных причин, происходит увеличение количества кормов, которые ранее были менее многочисленны (собака). Отметим так же присутствие редко встречаемых в питании хищника видов лисицы (n=1) и енотовидной собаки (n=2), которые были отмечены в желудках особей добытых в середине-конце 90-х гг. Кроме этого, при троплении волков на Кинбурнской косе Николаевской области в 2003-2004 гг. нами были зарегистрированы 2 случая поедания енотовидной собаки [16].

В целом отметим, что формирование адаптационных механизмов волка к условиям окружающей среды, которые в условиях юго-востока Украины обусловлены сильнейшим антропогенным влиянием, очень сильны. Ещё Н.Н.Руковский [8] отмечал факт частоты поедания хищником домашних животных в зависимости от обеспеченности его естественными кормами. Кроме того, огромное влияние имеет видовое разнообразие потенциальных жертв и доступность пищевых ресурсов [10; 12]. Согласно имеющихся сведений о низкой плотности охотничьих животных в угодьях юго-востока Украины, а также повсеместное присутствие человека, направляют волка на поиск более доступного корма, которым в данном случае являются павшие сельскохозяйственные животные на скотомогильниках.

Красноречивым примером может служить Павлоградский р-н Днепропетровской области, где, несмотря на то, что плотность диких копытных, таких как косуля, кабан, в лесу значительно выше чем в степи, волк в лесных угодьях не держится. По мнению гл. охотоведа Павлоградского УООР С.В.Тимченко волк избегает лесных угодий, так как, несмотря на значительную численность копытных,

интенсивная рекреационная нагрузка (грибники, отдыхающие, охотники) отпугивает хищника. Возможно, это одна из причин обуславливающих отсутствие волка в данных угодьях. Мы считаем, что в этом случае основной факт, влияющий на посещаемость волка, это наличие более легко доступного корма в степной зоне, в виде падали. Подобная ситуация была описана Л.С.Рябовым [17] в «Казённом лесу» Каменского района Воронежской области.

При троплении стаи волков на Кинбурнской косе Николаевской области в 2003-2004 гг. нами было отмечено преобладание в их экскрементах останков диких животных. Но, в данном случае, частая регистрация фактов нападения на домашних животных [16], подтверждает факт использования волком, прежде всего более доступных пищевых компонентов. Необходимо отметить, что все зарегистрированные случаи нападения были совершены на животных оставленных без присмотра, чему в значительной степени способствовал тот факт, что на многих улицах дома расположены на значительном удалении друг от друга. Первый случай был зарегистрирован в июне 2003 г., когда волки напали на 2-х овец, оставленных на ночь за пределами двора в центре с. Покровка. По устному сообщению помощника лесничего Васильевского лесничества С.В.Соляр, летом 2003 г. волки напали на принадлежащего ей восьмимесячного бычка, который находился в состоянии свободного выпаса в дневное время. По всей видимости, волки отбили его от стада, но телёнок сумел дойти до дома и погиб на глазах у хозяев. Брюшная полость была разодрана и внутренние органы свисали наружу. В октябре 2003 г. утром на улице была обнаружена обглоданная туша коровы. На шее была привязь с колом на противоположном конце, этот факт свидетельствует о том, что животное на ночь было оставлено на выпасе. В середине октября того же года, было отмечено нападение на лошадь с жеребенком, которые, также в ночное время находились на выпасе. Кобыла была обнаружена в сосновом массиве, где она зацепилась концом привязи за дерево, а жеребёнок найден на расстоянии нескольких сот метров от места пастьбы, в небольшом лиственном массиве.

На домашних собак в населённых пунктах Кинбурнской косы волк нападает постоянно, как в дневное, так и в ночное время. Эта тенденция в пищевом поведении хищника на территории косы имеет место и в настоящее время. Подобная избирательность волчьих охот в зависимости от уровня охраняемости объектов питания в различных регионах, была отмечена А.Я.Бондарёвым [18] для популяции юга Западной Сибири и Алтая, а также И.О.Киселюком [5] в Карпатском национальном природном парке.

При рассмотрении вопроса о питании волка важно, определить статус его популяции на юго-востоке Украины. Необходимо отметить, что вид обитает на данной территории только в периоды увеличения численности [11]. По данным Э.Г.Романа [19], который изучал поголовье волка Нижнеднепровских песков юга Украины, а также С.М.Жилы [20] исследующего поголовье вида в Украинском Полесье, популяция степных районов пополняется большей частью за счёт мигрантов из северных регионов. Т. о., рассматривая полученные нами данные о составе пищевого рациона волка, обитающего на территории юго-востока Украины, отметим, что преобладание в корме домашних животных, позволяет нам утверждать о наличии элементов синантропного поведения. Однако, обнаружение останков диких животных, говорит о том, что волк, в нашем регионе, не является исключительно синантропным видом. Мы считаем, что решающее значение в выборе кормовых объектов играет доступность пищевых ресурсов, что было отмечено ещё И.Г.Гурским [10].

Возможно, что для мигрирующих особей, которые преобладают на юго-востоке Украины это наиболее оптимальное поведение, т. к. в силу особенностей своей жизнедеятельности, они перемещаются из различных участков обитания с неодинаковым наличием и доступностью кормовых ресурсов. Таким образом, волк, обитающий на территории юго-востока Украины, скорее всего не имеет чётко выраженной приуроченности к определённому виду кормов. Возможно, если будут созданы условия для постоянно существующей популяции, будет закреплён определённый приоритет в выборе корма хищником.

Подводя итог, отметим, что все перечисленные выше примеры питания следует отнести к факту антропогенного влияния, возможно ведущего к изменению экологических особенностей волка. Исключительная изменчивость пищевых связей вида и её перестройка при изменении условий жизнедеятельности проявляется в увеличении доли падали в пищевом рационе, а также доминировании вида, который ранее был крайне редким (собака домашняя) и увеличением доли свиньи домашней, ранее редкого компонента.

Выводы

1. Преобладание синантропных видов животных в пищевом рационе волка юго-востока Украины характерно при различных показателях его численности.
2. В рационе питания волка преобладают доместицированные виды (41,4%). Объекты дикой природы составляют 17,9%.
3. Павшие сельскохозяйственные животные 45,8% от общего количества доместицированных видов, которые поедаются волками.
4. В пищевом рационе в значительном количестве присутствует ранее редкий пищевой компонент – собака домашняя (20,7%), а также отмечена более частая встречаемость свиньи домашней (12,1%).

5. При выборе компонентов питания волк, обитающий на юго-востоке Украины, в первую очередь использует наиболее доступные корма.

РЕЗЮМЕ

Вовк здавна складав конкуренцію людині, особливо у використанні трофічних ресурсів. Особливо актуальне це питання в теперішній час, при значній щільності людського населення в степових ландшафтах з обмеженим запасом мисливських тварин і інтенсивним веденням сільського господарства. Для дослідження харчового раціону вовка використовувалися методики аналізу вмісту шлунків і капрологічний аналіз. Було з'ясовано, що в раціоні хижака, що мешкає на південному-сході України, переважають кормі антропогенного походження.

SUMMARY

The wolf long since made a competition to the human being, especially concerning use of trophic resources. This question now is most actual, at significant density of the human population in steppe landscapes with the limited reserve of the hunting animals and intensive development an agriculture. For research of a nutrient diet of the wolf were used of methods analysis of contents of stomaches and analysis of excrements. It has been found out, that in a ration of a predator inhabiting in a southeast of Ukraine predominate feedstuff of an anthropogenic parentage.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Домніч В.І., Височин Д.В. Аналіз стану популяції європейської козулі (Capreolus capreolus) у південно-східному регіоні України та Криму // Питання біоіндікації та екології. – Вип. 6. – №1. – Запоріжжя, 2001. – С.104-114.
2. Волох А.М. Великі ссавці південної України в XX ст. (динаміка ареалів, чисельності, охорона та управління). – Автореф. дис... док. биол. наук. – Київ, 2004. – С.35.
3. Рябов Л.С. Волк на скотомогильнике: проблема требует решения // Охота и охотничье хоз. – 1987. – №8. – С.6-8.
4. Козлов В.В. Волк и способы его истребления. – М., 1955. – С.45-51.
5. Киселюк О.І. Стан популяції вовка (Canis lupus) в Карпатському національному природному парку // Вісник зоол. – №4. – 2001. – С.97-101.
6. Гаврин В.Ф., Донауров С.С. Волк в Беловежской пуще // Зоологический журнал. – 1954. – Т.33, вып. 4. – С.904-924.
7. Юдин В.Г. Лисица Дальнего Востока СССР. – Владивосток: Изд-во ДВНЦ АН СССР. – 1986. – С.282.
8. Руковский Н.Н. Питание // Волк. / Под ред. Бибиков Д.И. – М.: узд. Наука. – 1985. – С.325-336.
9. Valdman H., Andersone-Lilley Z., Koppa O., Ozolins J., Bagrade G. Winter diets of wolf Canis lupus and lynx Lynx lynx in Estonia and Latvia // Acta Theriologica, 2005. – 50 (4). – P.521-527.
10. Гурский И.Г. Волк на Украине и в Молдавии //Охота и охот. хоз-во. – 1982. – № 3. – С.10-11.
11. Гурский И.Г.Численность и особенности образа жизни по регионам: Украина, Молдавия // Волк / отв. ред. Бибиков Д. И. – М.: Наука. – 1985. – С.487-492.
12. Шейгас І.Н., Гунчак М., Шейгас Д. Волчья угроза: факты и выдумки // Мисливець і рибалка, №2. – 2002. – С.38-39.
13. Valdman H., Koppa O., Looga A. Diet and prey selectivity of wolf Canis lupus in middle-and south-eastern Estonia // Baltic Forestry. – 1998. – 4(1). – P.83-86.
14. Сагайдак А., Шквиря М. Роль вовка в мисливському господарстві Українського Полісся // Вістн. Львів. ун-ту.: серія біолог. – 2002. – Вип. 30. – С.90-92.
15. Рябов Л.С., Лихацкий Ю.П., Никитин Н.М. Волк Воронежского заповедника (трофические связи популяции). – Крупные хищники. – Сб. науч. тр. – М., 1992. – С.42-47.
16. Домнич В.И., Смирнова И.А. Экологические особенности волка в период повышения его численности на юге Украины // Поведение и поведенческая экология млекопитающих. Матер. научн. конфер. – Товарищество научных изданий КМК. – Москва, 2005. – С.305-307.
17. Рябов Л.С. Антропогенные корма волка // Экология поведение и управление популяциями волка. – Москва, 1989. – С.146-152.
18. Бондарёв А.Я. Волк юга западной Сибири и Алтая. – Изд. Барнаул. гос. педагог. ун-та: Барнаул. – 2002. – 178 с.
19. Роман Э.Г., 1996. Хищники рода Canis в Нижнем Приднепровье: динамика популяции стратегия выживания // Экосистемы дикой природы. Вып.5. – Одесса, 1993. – С.4-14.
20. Жила С.М. Вовки Українського Полісся: динаміка чисельності та деякі питання моніторингу. – Поліському природному заповіднику – 30 років. – Сб. наук.пр. – Житомир, 1999. – С.106-115.

Надійшла до редакції 23.05.2007 р.

УДК 611.018.51, 612.118, 577.151.6

ИЗМЕНЕНИЕ ПРОНИЦАЕМОСТИ МЕМБРАН ЭРИТРОЦИТОВ И КАТАЛАЗНОЙ АКТИВНОСТИ КРОВИ ПРИ ВИБРАЦИОННОМ СТРЕССЕ

О.И.Доценко, В.А.Доценко, Г.В.Тарадина

Введение

Вибрация является одним из распространенных факторов окружающей среды, приводящих к возникновению стресса. Установлено, что при длительном воздействии на организм она может привести к развитию вибрационной болезни, генез которой характеризуется своеобразным нарушением обмена веществ. Оказывая стрессовое воздействие, вибрация стимулирует гипофизарно-адреналовую систему, обеспечивая необходимый уровень биологически активных аминов, изменяет активность окислительно-восстановительных процессов, играющих важную роль в обеспечении неспецифической резистентности организма [1].

При изучении биологической роли воздействия физических факторов особое значение приобретают сведения о влиянии их на систему крови, которая является важной составной частью внутренней среды организма. Благодаря своей реактивности, она играет основополагающую роль в резистентности и развитии адаптации при действии на организм как различных внешних раздражителей, так и при нарушениях внутренней среды организма.

Кровь отвечает количественными и качественными изменениями своего состава на любые экзогенные и эндогенные воздействия в целях поддержания гомеостаза.

Согласно утвердившемуся мнению цитоплазматическая мембрана играет главную роль в адаптации клетки к действию различных факторов. Клетки, являясь конечным пунктом сложных адаптационных реакций, не только отражают общий уровень сопротивляемости организма, но и обеспечивают его [2, 3].

В связи с вышесказанным, цель работы состояла в изучении влияния низкочастотной вибрации на состояние мембран эритроцитов и каталазной активности крови беспородных мышей, находящихся на обычном рационе и на рационе, включающем солевое питье.

Изучение влияния низкочастотной вибрации на биологический объект макромолекулярного уровня дает возможность установить ряд закономерностей, касающихся механизма действия этого фактора.

Материалы и методы исследований

Опыты были проведены на белых беспородных мышах приблизительно одного возраста и массы, содержащихся в условиях вивария на обычном рационе. Животные были разделены на четыре группы: первая группа подвергалась вибрации и содержалась на обычном рационе, вторая – подвергалась вибрации и получала солевое питье за день до начала и затем в течение эксперимента (раствор NaCl, 1,7 г/дл), третья – не подвергалась вибрации и получала солевое питье, четвертую группу составляли интактные животные. Вибрацию животных осуществляли с помощью электромеханического преобразователя, подключенного к генератору сигналов Г6-27 [4]. Животные подвергались тридцатиминутной вибрации с частотами 2, 8, 16 и 24 Гц и постоянным ускорением 5± 2g в течение пяти дней.

В качестве характеристик, отражающих реакцию организма животного на вибрацию, нами использовались данные об активности фермента каталазы и о состоянии мембран эритроцитов, так как, во-первых, мембрана эритроцитов чувствительна к любым изменениям в организме; во-вторых, собственные частоты автоколебаний биомембран находятся в диапазоне 0,02 – 8 Гц [5].

Кровь для анализа брали сразу после окончания вибрации из хвостовых вен и использовали для изучения кинетики кислотного (0,004 М HCl) гемолиза и каталазной активности мембран эритроцитов. По спектрам поглощения гемолиза рассчитывали первые производные спектров (эритрограммы), которые использовали для определения константы гемолиза $\left(k_{1/2}\right)$ – величины, обратной времени полураспада клеток.

Для усиления дестабилизации мембран эритроцитов, вызванной вибрацией, к суспензии клеток прибавляли 0,2 мл раствора прооксиданта (витамин D_2) и инкубировали смесь в течение 1 часа при 37°С. Затем проводили кислотный гемолиз. Этот эксперимент был выполнен только с мышами второй и третьей групп. Раствор эргокальциферолла (витамина D_2) готовили разведением в 50 раз спиртового 0,125% раствора физиологическим раствором.

Каталазную активность мембран эритроцитов определяли по методике, основанной на способности молибдата аммония образовывать с перекисью водорода окрашенный комплекс [6]. Изменение каталазной активности в процессе вибрации характеризовали каталазным индексом – каталазной активно-

© Доценко О.И., Доценко В.А., Тарадина Г.В.

стью, отнесенной к количеству эритроцитов в крови (млн в 1мм^3). Подсчет количества эритроцитов в крови животных осуществляли в камере Горяева.

Статистический анализ полученных экспериментальных данных проводили в программе STATISTICA.

Результаты эксперимента и их обсуждение

На рис. 1 показано изменение констант кислотного гемолиза эритроцитов мышей первой группы относительно контроля. Контрольной считали интактную группу животных (четвертая группа), для эритроцитов которых константы гемолиза в течение эксперимента оставались приблизительно на одном уровне. Анализ полученных данных показал, что увеличение частоты вибрации приводит к достоверному росту констант гемолиза ($p<0,05$). На частотах 16 и 24 Гц константы гемолиза увеличивались в 1,3 раза по отношению к контролю. Однако, для мышей первой группы, это увеличение сохранялось первые три дня и потом наблюдалось снижение значений констант гемолиза. На пятый день эксперимента регистрируемые константы гемолиза эритроцитов мышей, подвергавшихся вибрации достоверно не отличались от контроля.

На рис. 2 показано изменение констант кислотного гемолиза эритроцитов мышей 2-й и 3-й групп по отношению к контролю. Частоте 0 Гц на рис. 2 соответствует изменение констант гемолиза эритроцитов мышей 2-й группы, получавшей только солевое питье. Для эритроцитов животных этой группы наблюдали незначительный рост констант гемолиза в течение первых трех дней эксперимента, и их спад на четвертый и пятый день (та же тенденция изменения, что и для мышей первой группы). Для эритроцитов мышей, подвергавшихся вибрации и получавших солевое питье, мы наблюдали увеличение констант гемолиза, относительно контроля, причем увеличение частоты вибрации приводило к росту констант гемолиза. На частотах 8, 16 и 24 Гц наблюдался резкий рост констант гемолиза; на частоте 16 Гц константа гемолиза возрастала в 1,7 раза по сравнению с контролем. Для мышей первой группы, вибрируемых на частотах 16 и 24 Гц, мы наблюдали высокие значения констант гемолиза в течение всего времени эксперимента.

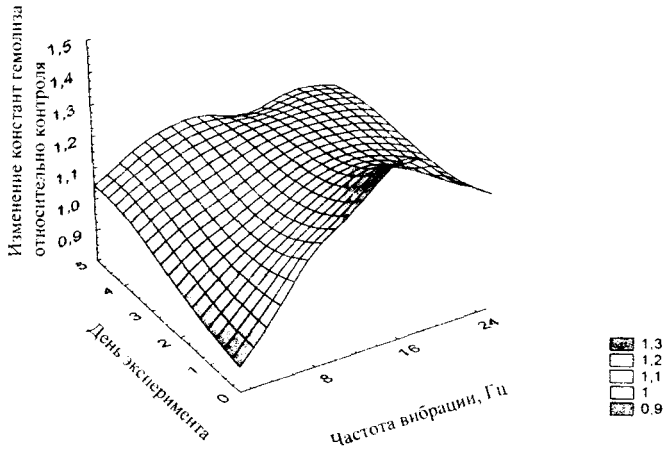


Рис. 1. Изменение констант гемолиза относительно контроля в зависимости от двух факторов: частоты и длительности вибрации для животных первой группы

Далее мы проследили, как изменятся константы гемолиза, если к суспензии клеток добавить прооксиданты, в качестве которых использовали витамин D_2. После инкубирования смеси в течение 1 часа при 37°С, проводили кислотный гемолиз. На рис 3. показано изменение констант окислительного гемолиза, в зависимости от двух факторов – частоты и длительности эксперимента. Мы видим резкий рост констант гемолиза на частоте 16 Гц, на второй день эксперимента и эта тенденция сохраняется в последующие дни эксперимента. Таким образом, вибрация с частотой 16 Гц оказывает наибольшее дестабилизирующее воздействие на состояние мембран эритроцитов, что проявляется в снижении устойчивости к действию гемолитического агента.

Как видно из рис. 4 у мышей под воздействием вибрации наблюдалось уменьшение абсолютного количества эритроцитов периферической крови. Можно утверждать, что низкочастотная вибрация инициировала процесс разрушения эритроцитов в крови животных.

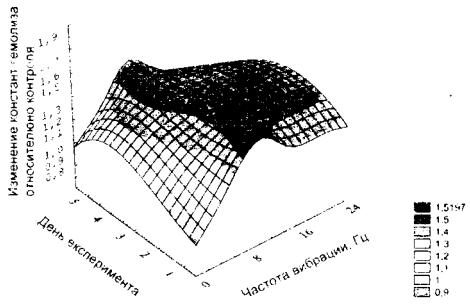


Рис. 2. Изменение констант гемолиза эритроцитов мышей по отношению к контролю в зависимости от двух факторов– частоты вибрации и длительности эксперимента

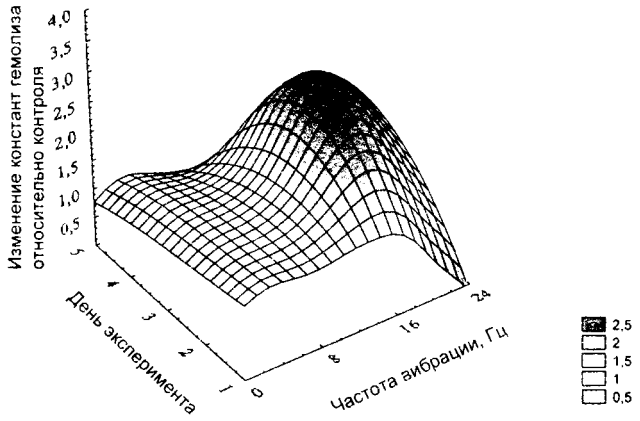


Рис. 3. Изменение констант гемолиза эритроцитов мышей в присутствии прооксидантов по отношению к контролю в зависимости от двух факторов– частоты вибрации и длительности эксперимента

Изменение каталазной активности эритроцитов для мышей первой группы, относительно контроля, показанно на рис. 5. Первые три дня эксперимента каталазная активность эритроцитов была минимальной, а на четвертый и пятый день наблюдалась тенденция к ее росту. Остановимся на некоторых моментах. Первые три дня эксперимента, на частотах 8, 16 и 24 Гц каталазная активность была существенно ниже контроля, особенно на второй день эксперимента. В этот же период и регистрировались высокие константы гемолиза для мышей первой группы (рис.1). На четвертый и пятый день мы наблюдали повышение каталазной активности по сравнению с контролем (на пятый день более чем в два раза выше контроля, что, вероятно, связано с повышенной концентрацией синтезированной в организме H_2O_2). Фермент каталаза относится к числу показателей, которые характеризуют в определенной степени биохимические системы, ответственные за сохранение целостности клеточных мембран [7]. Вероятно, повышение активности этого фермента и способствует снижению констант гемолиза, особенно на пятый день эксперимента.

Повышение активности каталазы является характерным проявлением стрессовой реакции, связанной с напряжением компенсаторно-приспособительных механизмов. После первоначальной реакции тревоги организм адаптируется и оказывает сопротивление, продолжительность которого зависит от врожденной устойчивости организма и силы стрессора [8]. В данном случае наблюдается этап срочной адаптации организма, который возникает непосредственно после начала действия фактора и реализуется на базе готовых, имеющихся в организме механизмов. Этими механизмами, очевидно, является активизация ферментов антиоксидантной защиты, к которым и относится фермент каталаза. Этап срочной адаптации реализуется в ингибировании процессов свободнорадикального окисления, что и проявляется в снижении констант гемолиза эритроцитов на четвертый и пятый день вибрационного воздействия.

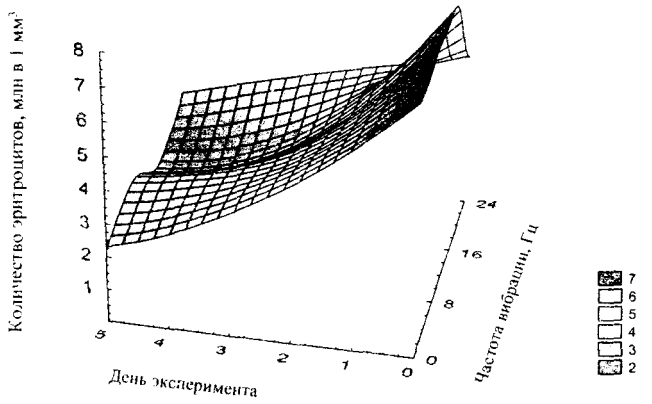


Рис. 4. Изменение количества эритроцитов в 1 мм^3 крови мышей под действием двух факторов – частоты вибрации и длительности эксперимента

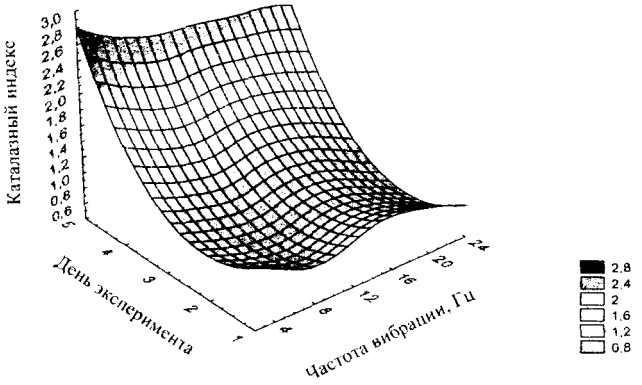


Рис.5. Изменение каталазного индекса мышей первой группы в зависимости от двух факторов – частоты и длительности вибрации

В связи со сказанным выше, мы решили выяснить, существует ли достоверная связь между каталазной активностью и значением констант гемолиза в нашем случае. Для животных первой группы найдена достоверная корреляционная зависимость между показателями первых трех дней (рис. 6), что дает основание утверждать, что снижение каталазной активности – это один из факторов, определяющих дестабилизацию мембран эритроцитов и увеличение констант гемолиза при воздействии вибрации.

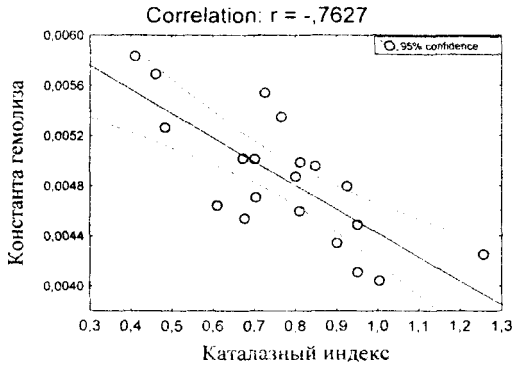


Рис. 6. Корреляция между константами гемолиза и каталазным индексом эритроцитов мышей первой группы

Изменение каталазной активности, по отношению к контролю, для мышей второй и третьей групп показано на рис. 7. Частоте 0 соответствует изменение каталазного индекса для группы мышей, которая находилась на солевом питье, но не подвергалась вибрации. Для этой группы мышей характерны стабильно высокие значения каталазной активности по отношению к контролю, что связано с компенсаторно-приспособительными реакциями организма. Для мышей, вибрировавшихся на частоте 2 Гц каталазная активность оставалась практически на уровне контроля.

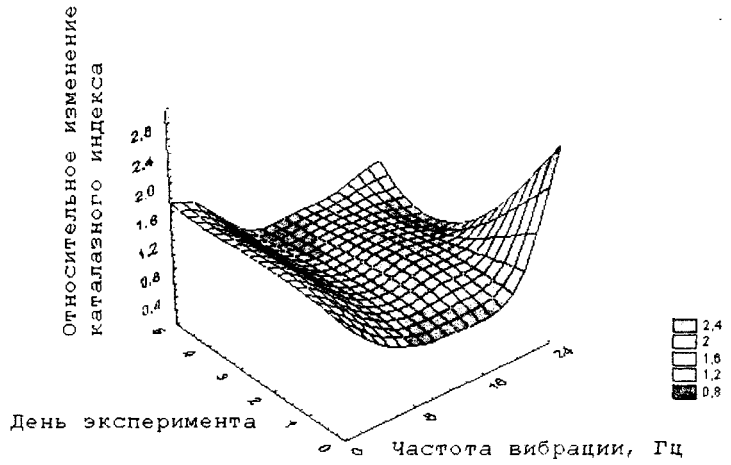


Рис. 7. Изменение каталазного индекса мышей в зависимости от двух факторов

Для мышей, вибрировавшихся на частотах 8, 16 Гц каталазная активность во все дни эксперимента была ниже контроля. На частоте 24 Гц в первый день эксперимента каталазная активность выше контроля, а затем также уменьшается, как и на других частотах.

Мы получили достоверную корреляционную зависимость между показателями каталазного индекса и значениями констант гемолиза (рис. 8), что позволяет предположить, что снижение каталазной активности – это один из факторов, который, по-видимому, определял увеличение константы гемолиза. Для построения корреляционной зависимости использовали данные 5-ти дневных наблюдений.

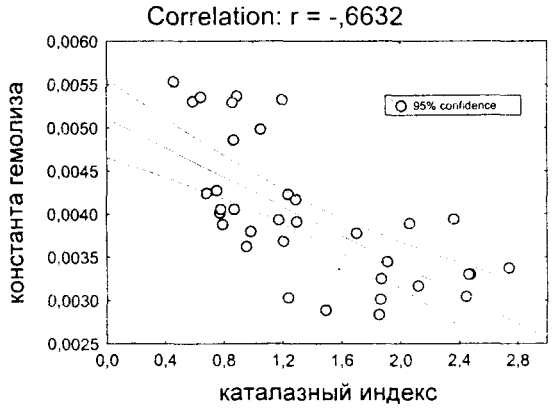


Рис. 8. Зависимость между константами гемолиза и каталазными индексами для исследуемой группы мышей

Низкие значения каталазной активности и предопределили высокие значения констант гемолиза для эритроцитов мышей, вирировавшихся на частотах 8, 16 и 24 Гц, и особенно 16 Гц, в течение пяти дней эксперимента

Выводы

1. Низкочастотные механические колебания существенным образом влияют на состояние мембран эритроцитов, снижая их стойкость к гемолитическим агентам, и на каталазную активность крови. Это действие неоднозначно и сильно зависит от частоты механических колебаний.

2. Характер изменения констант гемолиза и каталазной активности крови свидетельствуют об активизации процессов свободнорадикального перекисного окисления. На четвертый день эксперимента мыши 1-й группы адаптируются к действию вибрации (этап срочной адаптации).

3. Негативные факторы, угнетающие резистентность организма (в нашем случае солевое питье), могут усиливать негативное действие вибрации, угнетая активность каталазы и дестабилизируя мембрану эритроцитов.

4. Показана обратная линейная корреляция между значениями каталазной активности и константами гемолиза эритроцитов.

5. Вибрация с частой 16 Гц приводит к повышению констант гемолиза относительно контроля в 1,7 раза, на этой же частоте наблюдаются аномально высокие значения констант гемолиза в присутствии прооксидантов.

РЕЗЮМЕ

Миші, що утримувалися на різному раціоні, піддавалися тридцатихвилинній вібрації на частотах 2, 8, 16 і 24 Гц із постійним прискоренням 5±2g протягом п'яти днів. У динаміці експерименту визначали каталазну активність еритроцитів, константи гемолізу та кількість еритроцитів у крові. Показаний зв'язок між активністю ферменту каталази і зміненням констант гемолізу еритроцитів мишей.

SUMMARY

Mice, which were on the various ration, were exposed thirty minutes vibration on frequency 2, 8, 16, 24, 32, 40, 50 hertz with constant acceleration 5±2g during 5 days. In dynamics of experiment the catalyses activity, the number of erythrocytes in blood and the constants of cell's hemolysis were determined. Have been demonstrated the connection between catalyses activity and change of constants of cell's hemolysis of mice' erythrocytes.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Оганесян К.Р. Антиоксидантное влияние корня солодки голой на активность каталазы крови при вибрационной стрессе // Бюл. эксперим. биол. и медицины. – 2002. – № 8. – С.157-159.
2. Горизонтов П.Д. Система крови как основа резистентности и адаптации организма / Патологическая физиология и экспериментальная терапия. – М.: Медицина, 1981. – № 2. – С.323-325.
3. Соколовский В.В. Тиоловые антиоксиданты в молекулярных механизмах неспецифической реакции организма на экстремальное воздействие // Вопросы мед. химии. – 1988. – №1. – С.2-11.
4. Энглези А.П., Хиженков П.К., Нецветов М.В., Титов Ю.Д., Самотой О.Н., Доброродноваа О.И., Слоквенко А.А. Влияние низкочастотных физических факторов на морфологию и ионный обмен в очагах травматической деструкции головного мозга. 1. Механические колебания // Вісник проблем біології і медицини. – 2002. – Вип. 9-10. – С.48-54.
5. Хабарова О.В. Биоэффективные частоты и их связь с собственными частотами живых организмов // Биомедицинские технологи и радиоэлектроника. – 2002. – № 5. – С.56-66.
6. Королюк М.А., Иванова Л.И., Майрова И.Г., Токарев В.Е. Метод определения активности каталазы. // Лаб. дело. – 1991. – №1. – С.17-19.
7. Клиорин А.И., Тиунов Л.А. Функциональная неравнозначность эритроцитов. – Л.: Наука, 1974. – 148 с.
8. Айрапетянц М.Г., Гуляева Н.В. Роль свободнорадикального окисления липидов в механизмах адаптации // Вестн. АМН СССР. – 1988. – С.49-55.

Надійшла до редакції 25.04.2007 р.

УДК 612.444:612.741

ВЛИЯНИЕ ГИПЕРТИРЕОИДНЫХ СОСТОЯНИЙ РАЗЛИЧНОЙ СТЕПЕНИ ВЫРАЖЕННОСТИ НА СИЛОВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СКЕЛЕТНОЙ МЫШЦЫ БЕЛЫХ КРЫС

В.И.Соболев, В.В.Труш

Введение. Из многочисленных клинических наблюдений и физиологических исследований известно, что гиперфункция щитовидной железы влечет за собой возникновение целого ряда двигательных расстройств [1-7]. Не последнюю роль в генезе этих нарушений играют изменения в собственно скелетных мышечных волокнах и нервно-мышечных синапсах [3, 4, 8-13]. Вместе с тем точка зрения различных специалистов [4, 13-19] относительно характера и выраженности функциональных расстройств скелетной мускулатуры при гипертиреозе и тиреотоксикозе весьма неоднозначна. Так, многие исследователи [1, 4, 20-22] сходятся во мнении о том, что повышенный тиреоидный статус индивида сопровождается снижением мышечной силы, повышенной утомляемостью, высокой механической возбудимостью скелетных мышц, различной степенью их атрофии, возникновением тремора и т.д. Между тем некоторые авторы [1, 3, 23] подчеркивают, что разные скелетные мышцы при гиперфункции щитовидной железы неодинаково вовлекаются в патологический процесс, а атрофия мышцы, если она и развивается при тиреотоксикозе, не всегда сопровождается значимыми функциональными расстройствами. Более того, исследованиями днепропетровских нейрофизиологов [15, 24] показано, что чувствительность нервно-мышечного аппарата к тиреоидным гормонам во многом зависит от возраста животного организма. Наконец, в работах некоторых специалистов получены позитивные эффекты физиологических и повышенных доз йодтиронинов на активность и концентрацию Ca^{2+}-АТФазы [13, 19, 25-29], пассивную проницаемость мембран саркоплазматического ретикулума для ионов Ca^{2+} [17, 30-32], сродство контрактильного аппарата скелетного мышечного волокна к ионам кальция [16, 18], а также активность миозиновой АТФазы медленных мышечных волокон [14, 33, 34], что должно положительно отразиться на силовых и скоростных характеристиках отдельных мышечных волокон и в целом скелетных мышц. Возникает вопрос – чем обусловлено такое несоответствие между позитивными эффектами физиологических и повышенных доз тиреоидных гормонов на отдельные структуры мышечного волокна, наблюдаемыми в основном в условиях in vitro, и негативными изменениями мышечной силы и работоспособности при гипертиреозе и тиреотоксикозе, полученными при исследованиях на целостном организме? Не может ли в качестве одной из возможных причин такого разногласия выступать тот факт, что различными специалистами функциональное состояние скелетной мускулатуры оценивалось при разной степени выраженности реальных или моделируемых гипертиреоидных состояний, а также при различных условиях работы исследуемых скелетных мышц?

Целью настоящей работы явилось исследование влияния гипертиреоидных состояний различной степени выраженности на силовые характеристики скелетной мышцы белых крыс при различных внешних нагрузках. Для исследований нами была выбрана классическая модель нервно-мышечной системы, представленная комплексом малоберцового нерва, его синапсов и передней большеберцовой мышцы, и проведена оценка силовых характеристик мышцы белых крыс с различным тиреоидным статусом в условиях in situ, что максимально приближает нашу модель к реальным условиям. Для достижения поставленной цели мы сочли необходимым решить следующие задачи:

– выяснить влияет ли повышенный тиреоидный статус различной степени выраженности на характер зависимости величины мышечной работы от внешней нагрузки и диапазоны малых, оптимальных и больших внешних нагрузок передней большеберцовой мышцы белых крыс;

– определить закономерности изменения абсолютной и удельной (на 1 г массы мышцы) внешней работы мышцы в процессе углубления гипертиреоидного состояния;

– сопоставить степень изменения внешней работы мышцы с изменением ее массы в динамике развития гипертиреоза с целью выяснения возможных причин сдвигов этих показателей у гипертиреоидной группы животных по сравнению с эутиреоидной.

Материалы и методы исследования. Эксперименты проводились на 246 взрослых белых крысах-самках с исходной массой 220-240 г, первоначально разделенных на две группы – опытную (n=166) и контрольную (n=80). У животных опытной группы воспроизводили различные модели гиперфункции щитовидной железы путем хронического ежедневного введения L-тироксина в одинаковой суточной дозе (200 мкг/кг), но на протяжении различных интервалов времени. В частности, нами экспериментально создавались три модели гипертиреоидных состояний:

– умеренный гипертиреоз (гипертиреоидная группа, включала 20 крыс, получивших 15-20 ежедневных инъекций L-тироксина),

– тиреотоксикоз (тиреотоксикозная группа, включала 20 животных, получивших 45-50 ежеднев-

© Соболев В.И., Труш В.В.

ных инъекций L-тироксина),

– гипертиреоз различной степени выраженности (гипертиреоидная группа с различной степенью тяжести гипертиреоза, состояла из 126 крыс, получивших от 10 до 35 подкожных инъекций L-тироксина).

Критериями развития гипертиреоидных состояний у опытных крыс служили изменения массы тела, ректальной температуры, а также характера поведенческих реакций и общего физического состояния.

У наркотизированных крыс (этаминал натрия, 50 мг/кг) в условиях in situ исследовали величину внешней работы передней большеберцовой мышцы в диапазоне различных внешних нагрузок. Сокращение мышцы вызывали путем раздражения электрическим током малоберцового нерва (напряжение 500 мВ, частота 50 Гц, длительность импульсов 0,5 мс).

В зависимости от задач исследований в наших экспериментах применялось два режима работы передней большеберцовой мышцы. Так, в опытах, предполагающих определение диапазонов оптимальных, малых и больших внешних нагрузок для передней большеберцовой мышцы эутиреоидных животных и крыс с умеренным гипертиреозом и тиреотоксикозом, вызывалось несколько сокращений мышцы (от 1 до 5-6) с определенной нагрузкой, после чего имел место ее отдых в течение 1 минуты, а затем очередная мышечная работа с новой нагрузкой. При этом величина внешней нагрузки варьировала от 20 до 400 г с интервалом в 20 г, а сокращения мышцы с каждой заданной нагрузкой осуществлялись в режиме: 1 с – гладкое тетаническое сокращение, 2 с – пауза. При исследовании же характера изменения силовых характеристик мышцы гипертиреоидных животных в процессе углубления экспериментального гипертиреоза мышца сокращалась с определенной, постоянной на протяжении всего опыта нагрузкой в ритмичном режиме (1 с – гладкое тетаническое сокращение, 2 с – пауза) до тех пор, пока не развивалось почти полное ее утомление. Причем почти полным считалось такое утомление мышцы, при котором амплитуда ее укорочений снижалась на 90% относительно максимально достижимого мышцей уровня. Внешние нагрузки в таких экспериментах составляли 40, 80, 120, 160, 200 и 240 г.

На основании эргограмм, отражающих степень укорочения передней большеберцовой мышцы при поднятии грузов разной массы (от 20 до 400 г), определяли величину внешней работы мышцы в диапазоне различных нагрузок. По записям же степени укорочения мышцы в случае ее ритмичной работы с какой-то определенной, постоянной на протяжении всего опыта нагрузкой (40 г или 80 г и т.д. вплоть до 240 г), рассчитывали величину максимально достижимой внешней работы мышцы при данной нагрузке.

Экспериментальные данные обрабатывались общепринятыми методами математической статистики. Так, для оценки достоверности различий между центральными тенденциями несвязанных выборок использовался критерий Манна-Уитни, а достоверность различий между средними значениями связанных выборок устанавливали с помощью критерия Вилкоксона. С целью выявления зависимости величины определенных параметров мышечного сокращения от ректальной температуры, отражающей степень выраженности экспериментального гипертиреоза, применялись методы регрессионного анализа.

Результаты исследований и их обсуждение. Анализ результатов исследования мышечной работы животных с умеренным гипертиреозом и тиреотоксикозом, а также характера ее изменений по мере углубления экспериментального гипертиреоза показал, что различные модели гипертиреоидных состояний сопровождаются во многом однонаправленными, но в разной степени выраженными, сдвигами силовых характеристик передней большеберцовой мышцы.

Во-первых, повышенный тиреоидный статус повлиял на диапазоны малых, оптимальных и больших внешних нагрузок для исследуемой мышцы опытных животных, хотя в целом зависимость внешней работы от величины нагрузки носила сходный характер у эу-, гипертиреоидных и тиреотоксикозных крыс (рис. 1, 2).

Так, у животных с искусственно индуцированными умеренным гипертиреозом (15-20 инъекций L-тироксина в дозе 200 мкг/кг) и тиреотоксикозом (45-50 инъекций L-тироксина в дозе 200 мкг/кг) наблюдался некоторый сдвиг влево кривой, отражающей зависимость мышечной работы от внешней нагрузки. Причем более выраженным этот сдвиг оказался у тиреотоксикозных крыс. Если оптимальные нагрузки, при которых выполняется максимальная работа, для передней большеберцовой мышцы эутиреоидных животных находились в пределах 120-140 г, то для гипертиреоидных они составляли 100-120 г, а для тиреотоксикозных – 60-80 г ($P<0,01$, см. рис. 1). Диапазоны малых и больших нагрузок для исследуемой мышцы эутиреоидных крыс соответственно составили 20-100 г и 160-400 г, тогда как для гипертиреоидных – 20-80 г и 140-400 г, а для тиреотоксикозных – 20-40 г и 100-400 г ($P<0,01$).

Наряду с уменьшением величины оптимальной для исследуемой мышцы внешней нагрузки, хроническое введение L-тироксина в животный организм сопровождалось и снижением объема максимальной мышечной работы. В частности, у гипертиреоидных крыс характеризуемый показатель (7,3±0,54 мДж при нагрузке в 100 г) оказался на 29±5,2%, а у тиреотоксикозных (3,7±0,41 мДж при нагрузке в 60 г) на 64±3,99% меньше ($P<0,05$) контрольного значения (10,4±0,65 мДж при нагрузке в 120 г).

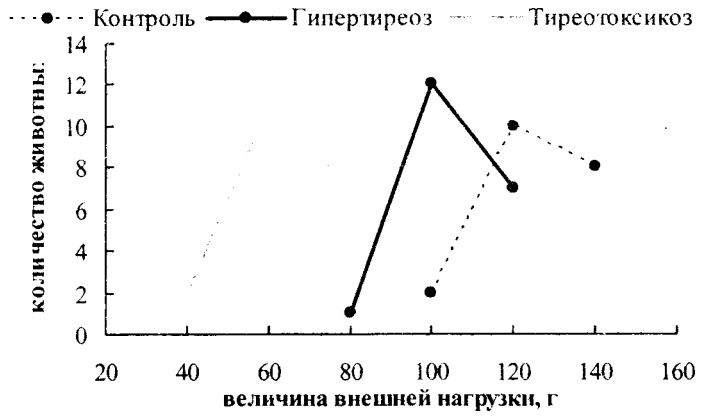


Рис. 1. Распределение животных в группах с различным тиреоидным статусом (контроль, умеренный гипертиреоз и тиреотоксикоз) в зависимости от величины оптимальной нагрузки для передней большеберцовой мышцы (количество животных в каждой группе равно 20)

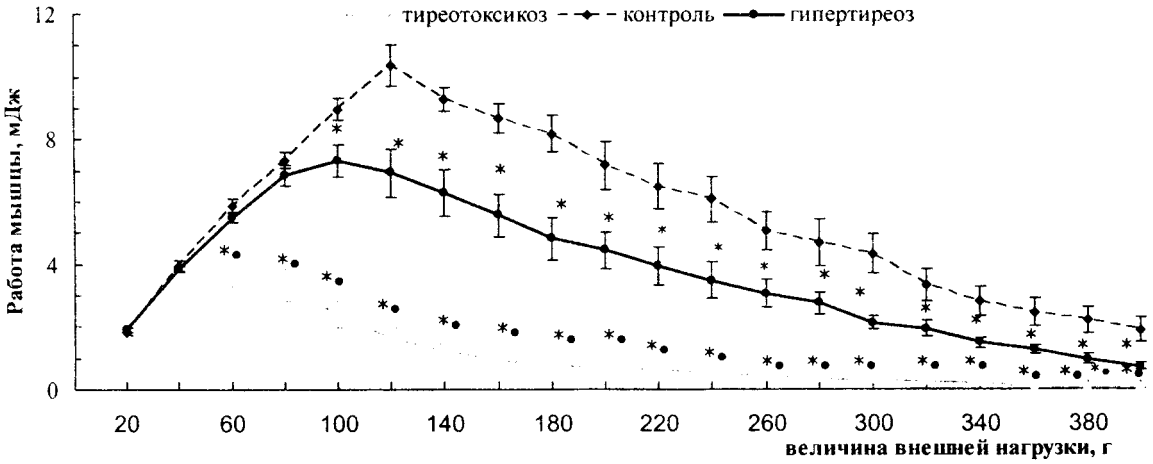


Рис. 2. Зависимость величины работы передней большеберцовой мышцы эутиреоидных (n=20), гипертиреоидных (n=20) и тиреотоксикозных (n=20) крыс от внешней нагрузки.

Примечание: * – различия статистически значимы по сравнению с уровнем контроля (P<0,05);

• – различия статистически значимы по отношению к соответствующим значениям гипертиреоидных крыс (P<0,05)

Во-вторых, работа передней большеберцовой мышцы гипертиреоидных и тиреотоксикозных животных претерпевала неоднозначные изменения в диапазоне малых, средних и больших внешних нагрузок (см. рис. 2). Так, при использовании в эксперименте малых нагрузок (20-80 г для гипертиреоидных и 20-40 г для тиреотоксикозных животных) величина внешней работы, выполняемой мышцей опытных крыс, не отличалась от таковой контроля, несмотря на снижение мышечной массы. Причем масса передней большеберцовой мышцы гипертиреоидных (147±3,0 мг/100 г массы тела) и тиреотоксикозных (127±3,1 мг/100 г массы тела) животных оказалась меньше (P<0,01) эутиреоидного уровня (164±4,3 мг/100 г массы тела) соответственно на 10±2,0% и 22±2,4%, что свидетельствует в пользу развития атрофических изменений в ней. Таким образом, при неизменном общем уровне внешней работы мышцы гипертиреоидных и тиреотоксикозных крыс величина работы, выполняемой отдельными мышечными волокнами, а, следовательно, и развиваемая ими сила несколько возрастали. В результате этого силовые характеристики всей мышцы в диапазоне малых нагрузок не претерпели существенных изменений, несмотря на имевшее место уменьшение мышечной массы.

В случае применения в эксперименте средних и больших нагрузок (100-400 г для гипертиреоидных и 60-400 г для тиреотоксикозных крыс) и у гипертиреоидных, и у тиреотоксикозных животных наблюдалось уменьшение величины внешней работы передней большеберцовой мышцы по сравнению с эутиреоидным уровнем (P<0,05), свидетельствующее в пользу снижения ее силовых характеристик. Причем отмеченное снижение мышечной работы носило более выраженный характер у крыс с тиреотоксикозом и нарастало по мере увеличения массы поднимаемого мышцей груза. Если процентное умень-

шение мышечной работы у гипертиреоидных животных относительно контрольного уровня находилось в пределах от 18,5±5,96% (при нагрузке в 100 г) до 62±6,0% (при нагрузке в 400 г), то у крыс с тиреотоксикозом – от 37±7,1% (при нагрузке в 60 г) до 98±0,56% (при нагрузке в 400 г). Следовательно, снижение мышечной работы у крыс с повышенным тиреоидным статусом в диапазоне средних и больших нагрузок превосходило степень уменьшения мышечной массы, и это обстоятельство, на наш взгляд, свидетельствует либо в пользу уменьшения силы сокращения, развиваемой отдельными мышечными волокнами, либо о функциональном выключении части волокон из сократительного акта.

Таким образом, при исследовании силовых характеристик передней большеберцовой мышцы животных с умеренным гипертиреозом и тиреотоксикозом мы наблюдали, на первый взгляд, парадоксальную картину. В случае работы мышцы гипертиреоидных и тиреотоксикозных крыс с малыми внешними нагрузками ее силовые характеристики не отличались от таковых эутиреоидных животных, более того, мышца выполняла одинаковую с контрольным уровнем работу, несмотря на некоторое снижение мышечной массы, свидетельствующее в пользу развития атрофических изменений. В режиме оптимальных и больших грузов, напротив, имело место уменьшение среднего уровня внешней работы исследуемой мышцы, отражающее снижение ее силовых характеристик.

Подобная ситуация выявлялась и при изучении характера изменения внешней работы передней большеберцовой мышцы по мере углубления экспериментального гипертиреоза (от 10 до 35 инъекций L-тироксина в дозе 200 мкг/кг) при различных нагрузках (табл. 1, рис. 3, 4).

Таблица 1. Значения коэффициентов линейной регрессии ($b \pm s_b$, %/°C), характеризующих зависимость внешней работы и массы передней большеберцовой мышцы гипертиреоидных крыс от ректальной температуры

Величины, между которыми исследовалась зависимость	Масса груза, г					
	40	80	120	160	200	240
Работа мышцы – ректальная температура	-4,8± 5,7	0,5± 7,24	-26,4± 6,62*▪	-39,7± 4,32*•	-52,5± 5,25*•	-54,5± 5,62*•
Удельная работа мышцы – ректальная температура	25,2± 5,42*	25,4± 3,49*	-16,4± 9,03	-19,7± 3,39*	-31,1± 3,07*	-33,1± 4,37*
Удельная масса мышцы – ректальная температура	-25,7±2,47*					

Примечание: * – коэффициент линейной регрессии статистически значим ($P<0,05$); • – отличия от значения коэффициента линейной регрессии, характеризующего зависимость «удельная масса мышцы – ректальная температура» статистически значимы ($P<0,05$).

Так, при использовании в эксперименте малых грузов (40-80 г) мышечная работа гипертиреоидных крыс не претерпевала существенных изменений с повышением ректальной температуры, отражающим прогрессирование гипертиреоидного состояния (см. рис. 3), тогда как мышечная масса неуклонно снижалась со скоростью -25,7±2,47%/°C (см. рис. 5). Данное обстоятельство, на наш взгляд, свидетельствует об увеличении мышечной силы развиваемой меньшей массой мышечных волокон и служит основной причиной наблюдаемого нами повышения удельной работы мышцы (работы на 1 г массы мышцы) по мере углубления экспериментального гипертиреоза (со скоростью 25,2±5,42%/°C при нагрузке в 40 г и 25,4±3,49%/°C при нагрузке в 80 г, см. рис. 3). В случае применения оптимальной нагрузки (120 г, см. рис. 3) средний уровень внешней работы мышцы крыс с различной степенью выраженности гипертиреоза (7,1±0,34 мДж) оказался на 31±3,3% ниже контрольного значения (10,3±0,18 мДж), что свидетельствует в пользу снижения силовых характеристик всей мышцы. Вместе с тем сила, развиваемая отдельными мышечными волокнами, не претерпевала существенных изменений в процессе развития гипертиреоза, о чем свидетельствует тот факт, что степень снижения мышечной работы по мере повышения ректальной температуры (-26,4±6,62 %/°C) у гипертиреоидных крыс была пропорциональна уменьшению массы исследуемой мышцы (-25,7±2,47 %/°C). В диапазоне же больших внешних нагрузок (160-240 г, см. рис. 4) с углублением гипертиреоидного состояния происходило прогрессирующее уменьшение работы передней большеберцовой мышцы, превосходящее ($P<0,05$) степень снижения ее массы. Данное обстоятельство свидетельствует, по всей вероятности, в пользу уменьшения силовых характеристик мышцы в процессе развития экспериментального гипертиреоза и служит главной причиной падения удельной мышечной работы по мере повышения ректальной температуры.

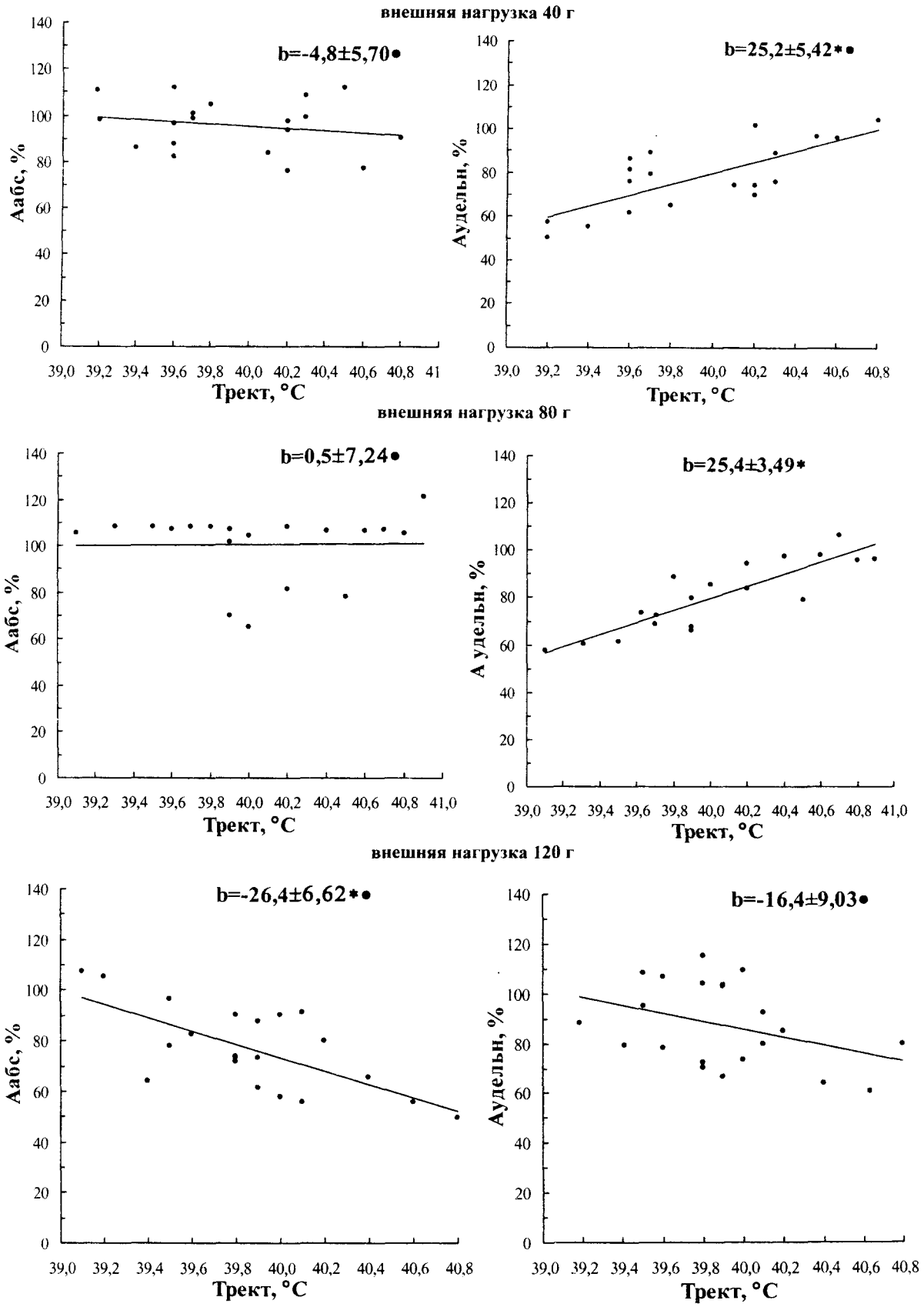


Рис. 3. Характер изменения процентных значений абсолютной и удельной мышечной работы по мере прогрессирования гипертиреоза при малых (40-80 г) и средних (120 г) внешних нагрузках

Примечание: * – коэффициент линейной регрессии статистически значим (P<0,05); • – размерность коэффициентов линейной регрессии – %/°С. Аабс и Аудельн – абсолютная и удельная мышечная работа, Трект – ректальная температура, °С

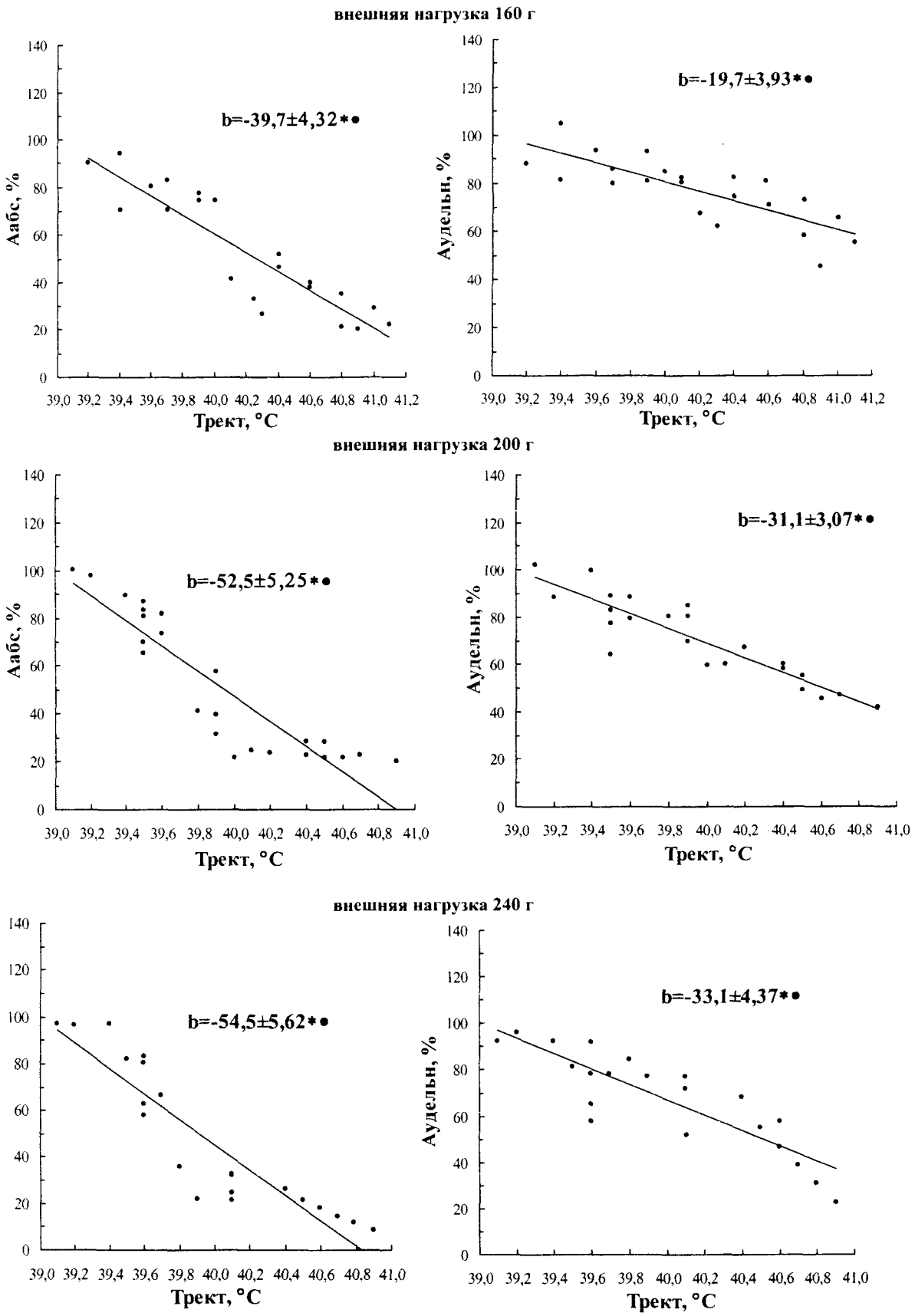


Рис. 4. Характер изменения процентных значений абсолютной и удельной мышечной работы по мере прогрессирования гипертиреоза при больших (160-240 г) внешних нагрузках.

Примечание: * – коэффициент линейной регрессии статистически значим (P<0,05); • – размерность коэффициентов линейной регрессии – ‰/°С. Аабс и Аудельн – абсолютная и удельная мышечная работа; Трект – ректальная температура, °С

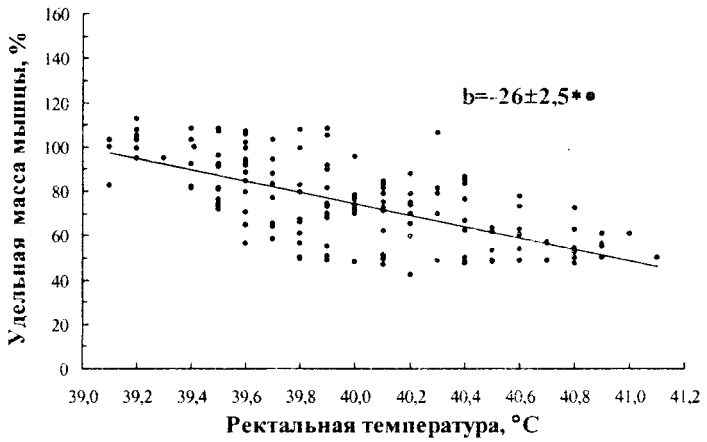


Рис. 5. Характер изменения массы передней большеберцовой мышцы белых крыс (%) по мере прогрессирования гипертиреоза.

Примечание: * – коэффициент линейной регрессии статистически значим (P<0,001); • – размерность коэффициента линейной регрессии – %,°С

Наиболее логичное объяснение полученным нами фактам, очевидно, состоит в следующем. В диапазоне малых внешних нагрузок сила, развиваемая отдельными работающими волокнами мышцы животных с повышенным тиреоидным статусом, больше таковой эутиреоидных крыс, поскольку общий уровень мышечной работы у опытных животных не отличался от эутиреоидных значений, несмотря на имевшее место снижение мышечной массы. При работе же передней большеберцовой мышцы гипертиреоидных крыс с большими внешними нагрузками ее силовые характеристики снижались по мере повышения ректальной температуры, и степень этого снижения превосходила степень уменьшения мышечной массы.

Основными причинами ухудшения силовых характеристик передней большеберцовой мышцы животных с повышенным тиреоидным статусом, наблюдаемого нами при работе с оптимальными и большими внешними нагрузками, могут служить как минимум два обстоятельства. Не исключено, что определенную роль в снижении силовых характеристик мышцы гипертиреоидных и тиреотоксикозных крыс в условиях ее работы с оптимальными и большими грузами играет уменьшение силы мышечного сокращения, развиваемой отдельными ее волокнами. Такое предположение, однако, плохо увязывается с наблюдаемыми нами увеличением среднего уровня удельной мышечной работы у гипертиреоидных и тиреотоксикозных животных при малых нагрузках, а также с прогрессирующим повышением этого показателя по мере углубления экспериментального гипертиреоза (оба эти факта, напротив, свидетельствуют в пользу увеличения силы сокращения отдельных работающих мышечных волокон). В таком случае наиболее вероятным объяснением ухудшения силовых характеристик мышцы животных с повышенным тиреоидным статусом в режиме ее работы с оптимальными и большими нагрузками, на наш взгляд, является допущение о том, что большая, по сравнению с контролем, часть мышечных волокон просто выключается из сократительного акта по причине каких-то функциональных, метаболических или других изменений, тогда как в случае использования малых нагрузок эти волокна могут участвовать в механическом ответе.

Выводы

1. Умеренный гипертиреоз и тиреотоксикоз привели к уменьшению величин оптимальной для передней большеберцовой мышцы белых крыс внешней нагрузки и максимальной работы, которое носило более выраженный характер у тиреотоксикозных животных.

2. В диапазоне малых нагрузок величина работы скелетной мышцы гипертиреоидных и тиреотоксикозных крыс не отличались от эутиреоидного уровня, несмотря на имевшее место уменьшение мышечной массы, тогда как в диапазоне средних и больших нагрузок наблюдалось снижение работы мышцы, носившее более выраженный характер у тиреотоксикозных крыс.

3. Углубление экспериментального гипертиреоза не отражалось на величине работы мышцы в диапазоне малых нагрузок, тогда как в режиме оптимальных и больших нагрузок – сопровождалось ее снижением.

РЕЗЮМЕ

У дослідженнях на білих щурах в умовах *in situ* показано, що помірний гіпертиреоз і тиреотоксикоз супроводжуються зменшенням величин оптимального для переднього великогомілкового м'яза навантаження і максимальної роботи, яке носить більш виражений характер у тиреотоксикозних тварин. Зниження силових характеристик м'яза у тварин з підвищеним тиреоїдним статусом, а також з поглибленням гіпертиреозу спостерігалося тільки в діапазоні сере-

дніх і великих навантажень. Причому при використанні оптимального навантаження зниження м'язової роботи в процесі розвитку гіпертиреозу було пропорційним зменшенню маси м'яза, в діапазоні великих навантажень – перевищувало його.

SUMMARY

In the experiments of white rates in conditions *in situ* it has been shown that the moderate hyperthyroisys and thyrotoxicosys are being accompanied by reduction of size of optimum load for a forward tibial muscle and volume of maximum work, carrying more expressed character in thyrotoxicosys animals. Reduction of power characteristics of muscle in animals with increased thyroid status and also in process of a deepening hyperthyroisys was observed only in a range of medium and large loads. Reduction of a muscular power in the process of progress of hyperthyroisys was adequate to reduction of muscle's weight in the case of application of optimum load, and surpassed it in a range of large loads.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Агафонов Б.В., Калинин А.П., Можеренков В.П. Эндокринные миопатии. – М.: Медицина, 1984. – 41 с.
2. Гехт Б.М., Ильина Н.А. Нервно-мышечные болезни. – М.: Медицина, 1982. – 352 с.
3. Казаков В.М. Изменения скелетных мышц при экспериментальной тиреотоксической миопатии // Архив анатомии, гистологии и эмбриологии. – 1985. – № 8. – С. 84-91.
4. Патогенез двигательных расстройств при тиреотоксикозе / Гольбер Л.М., Гайдина Г.А., Игнатков В.Я., Алиев М.Н. / Под ред. Гольбера Л.М. – М.: Медицина, 1980. – 208 с.
5. Руководство по клинической эндокринологии. 2-е изд. / Под ред. Н.Т. Стариковой – СПб.: Питер, 1996. – 544 с.
6. Berlit P., Mahlberg U., Usadel K.H. Zur Frage der Pollyneuropathie bei Hyperthyreose – neune klinisch-neurophysiologische Stude // Schweiz. Arch. Neurol. und Psychiat. – 1992. – № 1. – P. 81-90.
7. Cakir Mehtap, Samanci Nehir, Balci Nilufer, Balci Mustafa Kemal Musculoskeletal manifestations in patients with thyroid disease // Clin. Endocrinol. – 2003. – Vol. 59, № 2. – P. 162-167.
8. Неруш П.О., Макій Є.А., Родинський О.Г. Особливості проведення нервово-м'язового збудження в умовах гіпертиреозу // Експериментальна та клінічна фізіологія і біохімія. – 2001. – № 4. – С. 22-25.
9. Резнік М.Є. Енергетика м'язового скорочення і холодовий термогенез у білих щурів при різному тиреоїдному статусі / Автореферат канд. діс. – Харків, 2002. – 18 с.
10. Родинський О.Г. Аналіз активності холінорецепторів скелетного м'яза в умовах експериментального гіпертиреозу // Одеський медичний журнал. – 2001. – Т. 68, № 6. – С. 33-35.
11. Ташмухамедов Б.А., Замараева М.В., Гагельганс А.И.и др. Структурно-функциональные особенности мембран саркоплазматического ретикулума скелетных мышц при тиреотоксикозе // Вопросы медицинской химии. – 1981. – № 6. – С. 769-773.
12. Callozzo V.J., Baldwin K.M. The influence of hyperthyroidism on maximal shortening velocity of slow and fast skeletal muscle // FASEB Journal. – 1990. – № 1. – P. 815.
13. Everts M.E. Effects of thyroid hormones on contractility and cation transport in skeletal muscle // Acta Physiol. Scand. – 1996. – Vol. 156, № 3. – P. 325-333.
14. Валиуллин В.В., Резвяков Н.П. Влияние экспериментального гипо- и гипертиреоза на фенотип интактных и денервированных скелетных мышц морской свинки // Морфология и люминесцентная гистохимия. – Чебоксары. – 1983. – С. 136-139.
15. Неруш П.О., Макій Є.А., Родинський О.Г. Вікові особливості функціонування нервово-м'язової системи щурів за умов гіпертиреозу // Фізіологічний журнал. – 2001. – № 5. – С. 12-17.
16. Caroccia L., Williams D.A., Wrigth A. et al. Effects of thyroid and parathyroid hormones on muscular activity // Proc. Austral. Physiol. and Pharmacol. Soc. – 1988. – P. 19-71.
17. Connelly T.J., Hayek R., Sukhareva M. et al. L-thyroxine activates the intracellular Ca^{2+} release channel of skeletal muscle sarcoplasmic reticulum // Biochem. Mol. Biol. Int. – 1994. – Vol. 32, № 3. – P. 441-448.
18. Sampson S.R., Bannett R.R., Shainberg A. Effects of thyroxine on transmembrane resting potentials of skeletal muscle cells in culture // J. Neurosci. Res. – 1982. – Vol. 8, № 4. – P. 595-601.
19. Warnick P.R., Davis P.J., Davis F.B., Cody V, Galindo J.Jr., Blas S.D. Rabbit skeletal muscle sarcoplasmic reticulum Ca^{2+}-ATPase activity: stimulation in vitro by thyroid hormone analogues and bipyridines // Biochem. Biophys. Acta – 1993. – Vol. 1153, № 2. – P. 184-190.
20. Гайдина Г.А., Бахенко С.П., Алексеева Р.М. О нарушении функции спинальных центров при диффузном токсическом зобе у детей (электромиографическое исследование) // Проблемы эндокринологии. – 1975. – № 4. – С. 18-22.
21. Гехт Б.М., Ильина Н.А. Нервно-мышечные болезни. – М.: Медицина, 1982. – 352 с.
22. Руководство по клинической эндокринологии. 2-е изд. / Под ред. Н.Т. Стариковой – СПб.: Питер, 1996. – 544 с.
23. Казаков В.М. Некоторые вопросы патогенеза миопатии у больных тиреотоксикозом // Журнал невропатологии и психиатрии им. С.С. Корсакова. – 1989. – № 7. – С. 73-79.
24. Неруш П.О., Макій Є.А., Родинський О.Г. Особливості нервово-м'язової передачі в онтогенезі в умовах експериментального гіпертиреозу //Історія та сучасні досягнення фізіології в Україні: Зб. наук. праць. – Київ. – 2001. – С. 61-62.
25. Davis P.J., Davis F.B. Nongenomic actions of thyroid hormone // Thyroid. – 1996. – № 6. – P. 497-504.
26. Dulhunty A.F. The rate of titanic relaxation is correlated with the density of calcium ATPase in the terminal cisternae of thyrotoxic skeletal muscle // Pflugers Archivs. – 1990. – Vol. 415, № 8. – P. 433-439.
27. Hartong R., Wang N., Kurokawa R., Lazar M.A., Glass C.K., Apriletti J.W., Dilimann W.H. Delincation of three differ-

ent thyroid hormone-response elements in promoter of rat sarcoplasmic reticulum Ca^{2+}ATFase gene // Journal of Biological Chemistry. – 1994. – Vol. 269, № 1. – P. 13021-13029.
28. Moriscot A.S., Sayen M.R., Hartong R.Wv.P., Dillmann W.H. Transcription of the rat sarcoplasmic reticulum Ca^{2+} adenosine triphosphatase gene is increased by 3,5,3'-triiodothyronine receptor isoform-specific interactions with the myocyte-specific enhaneer factor-2a // Endocrinology. – 1997. – Vol. 138, № 1. – P. 26-32.
29. Sayen M.R., Rohrer D.K., Dillmann W.H. Thyroid hormone response of slow and fast sarcoplasmic reticulum Ca^{2+}-ATFase mRNA in striated muscle // Mollecular and Cellular Endocrinology. – 1992. – Vol. 87, № 2. – P. 87-93.
30. Марзоев А.И., Максина А.Г., Азизова О.А., Владимиров Ю.А. Тироксин: структурные перестройки в мембранах саркоплазматического ретикулума скелетных мышц кролика // Бюллетень экспериментальной биологии и медицины. – 1980. – № 4. – С. 410-412.
31. Brodie C., Sampson S.R. Thyroid hormones upregulate Ca-channels in cultured skeletal muscle of the rat // Neuroscience Letters. – 1990. – Vol. 117, № 8. – P. 325-330.
32. Lomax R.B., Cobbold P.H., Allshire A.P., Cuthbertson K.S.R., Robertson W.R. Tri-iodothyronine increases intracellular calcium levels in single rat myocytes // Journal of Molecular Endocrinology. – 1991. – № 7. – P. 77-79.
33. Butler-Browne G.S., Barbet J.P., Thornell L.-E. Myosin heavy and light chain expression during human skeletal muscle development and precocious muscle maturation induced by thyroid hormone // Anatomy and Embryology. – 1990. – Vol. 181, № 7. – P. 513-522.
34. Gardahaut M.E., Fontainne-Perus J., Rouaud T., Bandman E., Ferrand R. Developmental modulation of myosin expression by thyroid hormone in avian skeletal muscle // Development. – 1992. – Vol. 115, № 1. – P. 1121-1131.

Надійшла до редакції 04.04.2007 р.

УДК 612.821.6

ВЛИЯНИЕ СОЦИАЛЬНОЙ ИЗОЛЯЦИИ НА ПРОЯВЛЕНИЯ ТРЕВОЖНОСТИ У САМОК БЕЛЫХ КРЫС В ПРИПОДНЯТОМ КРЕСТООБРАЗНОМ ЛАБИРИНТЕ

Г.А.Фролова

Введение. Тревожность как одна из характеристик высшей нервной деятельности является комплексным поведенческим показателем, на формирование которого влияют как факторы внешней среды, так и внутренней среды самого организма. Тревожность является одним из немногих эмоциональных состояний организма, которое может быть и естественной адаптивной эмоциональной реакцией и психопатологией. Для организма в норме тревожность полезна, поскольку выступает как позитивный мобилизирующий фактор, когда организм сталкивается с внешней угрозой [1, 2].

На протяжении последних лет исследования тревожности активизировались. Синтезировано большое количество новых антитревожных лигандов; механизмы тревожности интерпретируются с помощью новейших методик как на уровне клеток, так и на уровне целостного мозга.

Хорошо известно, что состояние тревожности обуславливается дисбалансом активности центральных возбуждающих и тормозных систем [3, 4]. Когда преобладает активность возбуждающих систем, состояние тревожности однозначно усиливается (анксиогенез). И наоборот, в случае доминирования активности тормозных систем состояние тревожности снижается (анксиолизис). Но неясно, как интерпретировать тот факт, что многие психостимуляторы и некоторые анксиогенные препараты в незначительных дозах могут приводить к противоположным анксиолитическим эффектам.

Важной и интересной проблемой так же является проблема взаимоотношений тревожности, страха и депрессии. Согласно общебиологической точке зрения, все эти состояния являются психофизиологическими вариациями стресс-ответа организма: страх появляется как реакция на имеющийся стрессор, а тревожность – как реакция на неявный стресс-фактор, которого индивид потенциально пытается избежать; депрессия же развивается как ответ на потенциально неизбегаемый стресс-фактор. В состоянии тревожности и страха у животного отмечается общее возбуждение, повышенная моторная активность и т.д. Депрессия, как правило, сопровождается противоположными явлениями [5, 6].

Для изучения проблемы тревожности и устойчивости к эмоциональному стрессу, патогенеза вызванных ими различных заболеваний необходимы физиологически адекватные экспериментальные модели [7].

Поиск адекватных моделей депрессивного состояния в экспериментальной физиологии – одна из актуальных задач патофизиологии высшей нервной деятельности. Предложено множество тестов, обладающих рядом достоинств и недостатков.

В нейроэтологии тревожности используются тесты-модели двух категорий. В тестах первой группы провоцируется конфликт, обычно – поощряя и наказывая один и тот же поведенческий ответ. При этом степень ингибирования условнорефлекторного ответа отражает уровень тревожности животного. Второй тип основан на анализе спонтанного поведения при помещении животного в незнакомую для него среду. Ожидание потенциальной опасности и новизна окружающей среды порождают тревожность. При этом степень ингибирования поведения – прежде всего, исследовательской активности как самостоятельной потребности в получении информации о новых стимулах – будет объективно отражать уровень тревожности. К числу наиболее достоверных относят тест «приподнятый крестообразный лабиринт» (ПКЛ), предложенный Хендли, который считают одной из наиболее адекватных и специфичных моделей тревожности. Данный тест основан на том наблюдении исследователей, что животные проводят меньшее время в открытых рукавах крестообразного лабиринта, чем в закрытых. Валидность теста состоит в том, что он является достаточно чувствительным к поведенческим манипуляциям, заведомо усиливающим стрессированность животного, с одной стороны. С другой – использование такой модели тревожности оправдывается тем, что он основан на тех же природных стимулах, которые способны вызвать тревожность и у людей. Т.е. используется баланс естественного страха животных перед новизной, открытым пространством и высотой и одновременного стремления исследовать незнакомые условия, что характерно для грызунов [6].

Целью настоящей работы является исследование изменений поведенческих показателей самок белых крыс с разным уровнем тревожности после воздействия социальной изоляции, являющейся для крыс достаточно сильным стресс-фактором.

Методика исследования. Эксперимент был выполнен на 20 половозрелых самках белых крыс массой 220-340 г. Животные содержались в виварии при стандартных условиях. После троекратного тестирования с использованием поведенческой модели «приподнятый крестообразный лабиринт» исследуемые животные были разделены на три группы в соответствии с различным уровнем тревожности:

© Фролова Г.А.

высоким, средним и низким.

Лабиринт состоит из двух закрытых (огороженных с двух сторон) и двух открытых рукавов, расположенных крестообразно. Размеры рукавов: открытый – 10×50 см, закрытый – 10×10×50 см, площадь центральной платформы – 10×10 см. Закрытые рукава не имели крыш, были огорожены только с боков. Лабиринт фиксирован на высоте 80 см над уровнем пола.

Во время проведения тестирования экспериментальное животное помещали в центр лабиринта в положении носом в открытый рукав. На протяжении 5 минут производилось наблюдение за поведением крысы. Регистрировались следующие показатели и параметры: количество заходов в закрытые рукава, количество выходов на открытую часть ПКЛ (открытые рукава + центральная платформа) и время нахождения в нем, количество выглядываний из закрытых рукавов, количество дефекаций.

Критерием разделения на группы с разным уровнем тревожности служила величина отношения (ОТН) числа заходов в светлые рукава к сумме заходов в светлые и темные рукава. Этот показатель является стандартным в методике оценки тревожности крыс и мышей. Чем он ниже, тем выше тревожность [8].

Затем к изучаемым животным была применена модель стресса под названием социальная изоляция. Социальная изоляция представляет собой помещение экспериментального животного на 72 часа в отдельную клетку. На третьи сутки крыса подвергалась тестированию в условиях «приподнятого крестообразного лабиринта», после чего животное возвращалось обратно в общую клетку.

Полученные данные обрабатывались общепринятыми методами математической статистики с использованием непараметрического U – критерия Манна-Уитни для оценки достоверности результатов.

Результаты исследования. По результатам исследования в контроле, животные были разделены на уровни тревожности (УТ) следующим образом. Группу с высоким уровнем тревожности составили 4 самки (табл. 1), коэффициент ОТН у которых равнялся 0,09 ± 0,062. У самок данной группы почти не наблюдалось выходов в открытые рукава лабиринта. 6 самок составили группу со средним УТ, ОТН в которой равнялось 0,22 ± 0,035. Низкий уровень тревожности был показан 10-ю животными с отношением, определяющим степень тревожности, равным 0,38 ± 0,024 (рис. 1).

Таблица 1. Характеристики экспериментальной группы животных в контроле

	Высокий уровень тревожности	Средний уровень тревожности	Низкий уровень тревожности
ОТН	0,09 ± 0,062*	0,22 ± 0,035	0,38 ± 0,024*
Количество особей в группе	4	6	10

Примечание: * – отличия достоверны ($p_U < 0,05$) при сравнении показателей условного контроля (средний уровень тревожности, n = 6) с группами низкого (n = 10) и высокого уровня тревожности (n = 4).

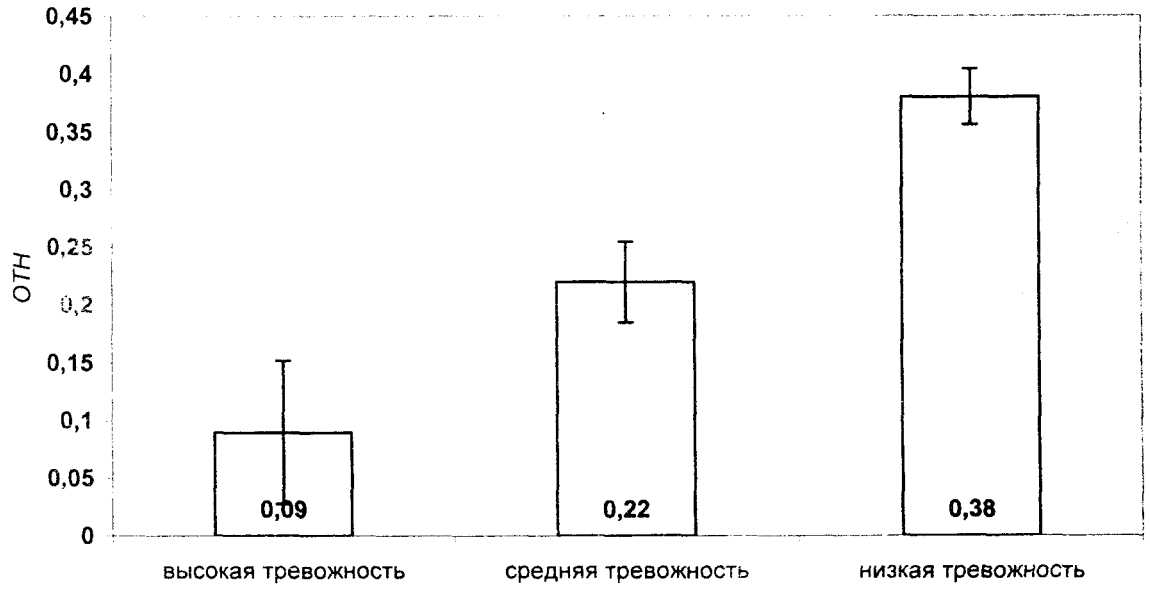


Рис. 1. Распределение популяции самок на группы с разным уровнем тревожности (контроль)

После применения к исследуемым популяциям модели стресса животные проходили повторное тестирование в условия теста ПКЛ. Выяснялось влияние эмоционального стресса на поведенческие характеристики экспериментальных животных. Для этого прослеживались изменения поведения крыс в условиях используемого теста в каждой из групп с различным уровнем тревожности.

Так, обнаружились следующие изменения в составе определенных групп (табл. 2).

Группа самок со средним уровнем тревожности увеличилась до 10 особей. У животных этой группы коэффициент ОТН составил 0,34 ± 0,022 (рис. 2).

После воздействия социальной изоляции у самок с высоким УТ наблюдалось полное отсутствие повторных посещений открытых частей лабиринта. Количество животных составляющих данную группу не изменилось.

Группа самок с низким уровнем тревожности сократилась до 6 особей, ОТН составил 0,42 ± 0,016.

Таблица 2. Характеристики экспериментальной группы животных после воздействия социальной изоляции

	Высокий уровень тревожности	Средний уровень тревожности	Низкий уровень тревожности
ОТН	0*	0,34 ± 0,022*	0,42 ± 0,016*
Количество особей в группе	4	10	6

Примечание: * – отличия достоверны ($p_U < 0,05$) при сравнении с соответствующими значениями контроля.

Наблюдаемые изменения в составе групп могут свидетельствовать о некоторой неустойчивости к действию эмоционального стресса части особей изучаемой популяции, а именно – переход между группами с разными УТ, показанными животными в контроле, после воздействия социальной изоляции. Так, 2 особи, показавшие в контрольных исследованиях высокий УТ в экспериментальном тестировании показали большую эмоциональную устойчивость и были определены в дальнейшем в группу со среднем уровнем тревожности. Так же, из группы со средним уровнем тревожности в контроле 3 особи показали высокую устойчивость к действию стресса и были отнесены к группе с низким УТ.

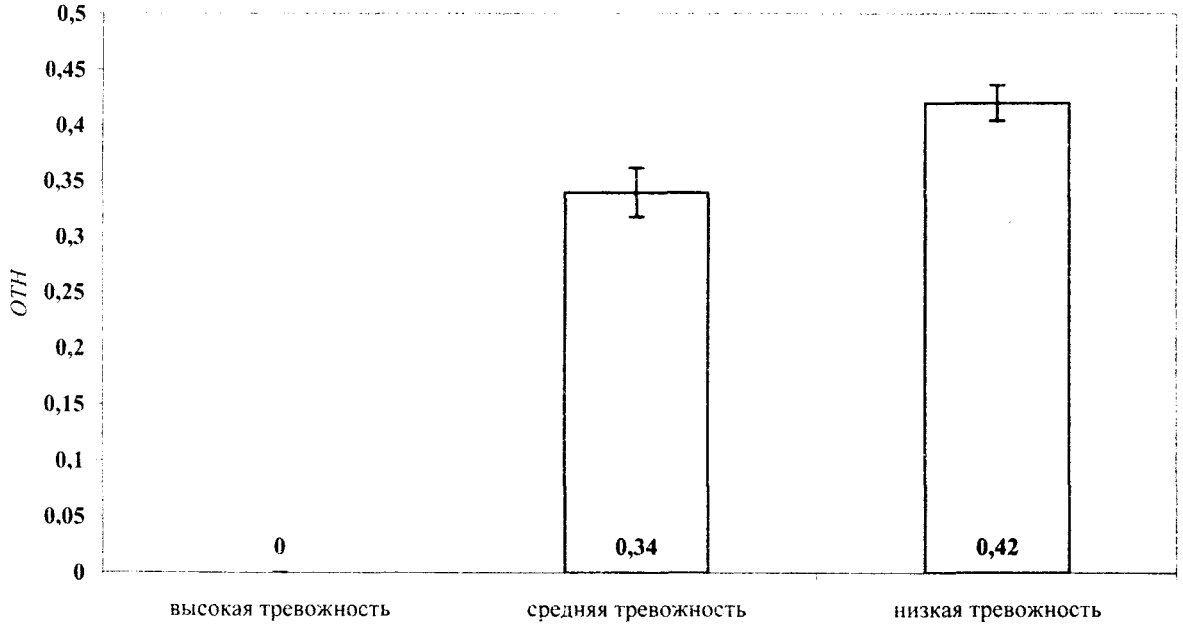


Рис. 2. Распределение популяции самок на группы с разным уровнем тревожности после воздействия социальной изоляции

Особый интерес представило то, что в группе с низким уровнем тревожности (в контроле) 2 самки показали высокий уровень тревожности – у них отсутствовали повторные выходы в открытые рукава крестообразного лабиринта и, следовательно, ОТН = 0. Эти животные были отнесены в группу с высоким уровнем тревожности по результатам экспериментального тестирования. Можно утверждать, что у этих самок развилась депрессия на фоне длительного воздействия стресс-фактора, которым явилась модель социальной изоляции.

Выводы. Как показала настоящая работа, группы исследуемых животных без разделения на УТ гетерогенны и различия могут быть скрыты усреднением данных. По этой причине в подобных исследованиях необходим контроль поведенческих показателей каждого животного. Учитывая, что экспериментальные животные с момента рождения содержались в одинаковых условиях и получали одинаковую пищу, проведенные эксперименты позволили сделать вывод, что предрасположенность к развитию психической депрессии является генетически детерминированной. Используемая в эксперименте модель эмоционального стресса позволяет выделить животных, склонных к развитию психической депрессии для последующей апробации фармакологических препаратов антидепрессантного действия.

РЕЗЮМЕ

Досліджено вплив соціальної ізоляції на прояви тривоги самок білих щурів за допомогою тесту «піднесений хрестоподібний лабіринт». Досліджена популяція розділена на три групи за рівнем тривоги. За результатами впливу моделі соціальної ізоляції встановлено міграцію тварин між групами із різним рівнем тривоги у контролі та виявлено риси депресії у двох тварин із початково низьким рівнем тривоги.

SUMMARY

The Explored influence to social insulation on manifestations anxiety females of the white rats by means of test «elated pluz maze» The Explored population was divided into three groups with different level of anxiety. On result of the influence to models to social insulation is installed migration animal between group with different initial level anxiety and is revealled line to depression beside two animals with low level anxiety in checking.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Калуев А.В. Одиннадцать актуальных вопросов нейробиологии тревожности // Нейрофизиология. – 1999. – Т. 31. – № 3. – С.229-231.
2. File S.E. Recent developments in anxiety. Stress and depression// Pharmacol. Biochem. Behav. – 1996. – V. 54. – № 1. – P. 3-12.
3. Нейрохимия. Под ред. И.П. Ашмарина. – Москва: Изд-во МГУ. – 1998.
4. Рейковский Я. Экспериментальная психология эмоций. – Москва: Прогресс. – 1979.
5. McNaughton N. Stress and behavioural inhibition // Stress – from Synapse to neuron. – 1993. – P. 79-98.
6. Калуев А.В. Стресс, тревожность и поведение. – Киев: Энигма, 1998. – 75 с.
7. Юматов Е.А., Певцова Е.И., Мезенцева Л.Н. Физиологически адекватная экспериментальная модель агрессии и эмоционального стресса // Журн. высш. нервн. деят. им. Павлова. – 1988. – Т. 38. – Вып. 2. – С. 350-354.
8. Лапин И.П., Мирзаев С.М. Отбор тревожных мышей трехкратным тестированием в приподнятом крестообразном лабиринте // Бюлл. экспер. биол. и мед. – 1996. – № 3. – С.355-356.

Надійшла до редакції 12.09.2007 р.

УДК 631.4:634.9+631.4:574

ДИНАМИКА СООБЩЕСТВ ПОЧВЕННЫХ ЖИВОТНЫХ С ПОЗИЦИЙ ТЕОРИИ НЕЙТРАЛЬНОГО РАЗНООБРАЗИЯ

О.Н.Кунах, А.В.Жуков,
Днепропетровский национальный университет

Поиск механизмов, которые лежат в основе распределения обилия видов продолжает привлекать значительное внимание специалистов (Magurran & Henderson 2003; McGill 2003a; Sugihara et al. 2003; Vallade & Houchmandzadeh 2003; Volkov et al. 2003; Etienne & Olff 2004; McKane, Alonso & Sole 2004). Теория нейтральности в экологии придает дополнительный импульс этим поискам благодаря тому, что с её помощью было показано, что типы разнообразия, которые возникают в естественных условиях, могут быть выведены из предположения о том, что организмы в сообществе обладают одинаковыми демографическими свойствами в пересчете на одну особь (Hubbell 2001). Развитие этой теории в последнее время сконцентрировано на описании относительного видового обилия нейтрального сообщества в масштабе метасообщества и локального сообщества (Vallade & Houchmandzadeh 2003; Volkov et al . 2003; McKane et al . 2004). Метасообщество определяется как отдельная в эволюционном отношении биогеографическая единица, в пределах которой многие из видов сообщества возникают, живут и погибают (He, 2005). В противоположность этому, локальное сообщество подвержено обмену мигрантами с метасообществом, или с другими локальными сообществами через иммиграцию или эмиграцию. Распределение обилия видов локального сообщества может быть описано мультиномиальным распределением (Hubbell 2001; McKane et al . 2004), или некоторыми другими моделями (Vallade & Houchmandzadeh 2003; Volkov et al . 2003), в то время как распределение лог-серий является хорошо известным способом описания метасообщества (Hubbell 2001; Volkov et al . 2003).

Концептуальное отличие между метасообществом и локальным сообществом играет важную роль в теории нейтральности биоразнообразия (Hubbell 2001). Метасообщество рассматривается как источник иммигрантов и динамически независимым от локального сообщества (Vallade & Houchmandzadeh 2003; Volkov et al. 2003; McKane et al . 2004). Виды в этих моделях рассматриваются не как полностью нейтрально-симметричные, так как их относительное обилие в локальном сообществе является функцией их относительного обилия в метасообществе. В отсутствие иммиграции, эти модели локального сообщества не могут конвергировать в модели метасообщества (т.е. мультиномиальные модели с нулевой суммой не могут быть сведены к распределению лог-серий). Это совершенно справедливо при применении для классической системы остров-материк, в которой локальные обилия видов на острове зависят посредством иммиграции от фиксированных численностей видов в метасообществе. Поэтому эти модели могут быть более точно названы островными моделями.

Однако, в действительности нет четкой линии, которая отделяет метасообщество и локальное сообщество. В реальных ландшафтах существует континуум от локального сообщества до крупномасштабного метасообщества. Континуум изменяется в степени, которая определяется динамикой сообщества вследствие миграции. В противоположность системам типа остров-материк, в непрерывных ландшафтах локальные сообщества вложены в метасообщество. Очень общим подходом для моделирования таких систем является предположение о полной симметричности локального сообщества, в котором видовое обилие подвержено влиянию локальной рождаемости и смертности, так же как иммиграции и эмиграции. Было показано, что рассмотрение четырех фундаментальных процессов популяционной динамики – рождаемость, смертность, иммиграция и эмиграция позволяют вывести полностью симметричную модель распределения относительного обилия видов в сообществе любого масштаба (He, 2005). Модель имеет вид:

$$< \phi_n >= \theta \frac{\Gamma(n+\alpha)\Gamma(n+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(n+1+\beta)} x^n, n = 1,2,\ldots, \quad (1)$$

где $< \phi_n >$ – число видов с численностью n особей; $\alpha=\lambda/b$, $\beta=\mu/d$, $x=b/d$, λ – скорость иммиграции, μ – скорость эмиграции, b – скорость рождаемости, d – скорость смертности. Параметр θ является нормализующим фактором, который позволяет при суммировании уравнения по всем n получить число видов в сообществе (для частот суммирование даст 1). Параметр θ имеет форму:

$$\theta = \frac{1+\beta}{\alpha x} \frac{1}{F(1+\alpha, 2+\beta, x)}, \quad (2)$$

где $F(1+\alpha, 2+\beta, x)$ – стандартная гипергеометрическая функция.

Предложенная модель является моделью локального сообщества, так как отражает влияние ми-

© Кунах О.Н., Жуков А.В.

грационных процессов. Можно показать, что при отсутствии миграции (α=β=0) модель легко редуцируется к модели распределения лог-серий метасообщества. Кроме того, при отсутствии эмиграции (μ=0 или β=0) модель принимает форму усеченного негативного биномиального распределения:

$$<\phi_n>=\theta\frac{\Gamma(n+\alpha)}{\Gamma(\alpha)}\frac{x^n}{n!}, n=1,2,... \quad (3)$$

Параметр x в модели имеет такое же значение, как и в распределении лог-серий Фишера, равный отношению скорости рождаемости к скорости смертности (Volkov et al. 2003). Генерализованная модель имеет два параметра (α и β) которые являются мерой относительной интенсивности в сообществе иммиграции по отношению к рождаемости и эмиграции по отношению к смертности. Дополнение в модель параметров, которые отражают миграционные процессы, обеспечивает более детальное рассмотрение влияния четырех базовых демографических процессов – рождаемости, смертности, иммиграции и эмиграции на распределение обилия видов. Высокое значение параметра α (т.е. интенсификация иммиграции по отношению к рождаемости) приводит сглаживанию распределения видового обилия с левой стороны. Такая форма распределения предполагает, что число редких видов не велико, а существенную часть сообщества составляют более обильные виды. Этот результат не противоречит выводам метапопуляционной теории (Hanski 1991), которая утверждает, что постоянная иммиграция должна препятствовать исчезновению редких видов путем увеличения их обилия. Защитный эффект, который оказывается на редкие виды в данной модели, рассматривается с нейтральной позиции, т.е. скорость иммиграции является независимой от обилия отдельных видов. В противоположность иммиграции, эмиграция сглаживает кривую распределения обилия видов с правой стороны, что отражает увеличение доли редких видов.

Как и в распределении лог-серий Фишера для метасообщества, параметр θ в данной модели также выступает в качестве параметра биоразнообразия и является функцией α, β и x.

В центре теории нейтрального разнообразия Хуббелла находится универсальный безразмерный параметр θ. Этот параметр явояется результатом произведения размера сообщества JM и скорости появления новых видов в сообществе ν, т.е. $\theta=2*J_M*\nu$. Фундаментальный параметр θ полностью определяет патерны биоразнообразия (распределение обилия видов – species-abundance distribution (SAD) и отношения виды-площадь – species–area relationship (SAR). Для метасообщества, в то время как для локального сообщества SAD и SAR определяются параметром биоразнообразия совместно с иммиграцией, эмиграцией рождаемостью и смертностью. Параметр θ имеет функциональную связь с индексом разнообразия Симпсона (He, Hu, 2005):

$$D_S=\frac{\theta}{1+\theta}, \quad (4)$$

где D_S – индекс разнообразия Симпсона. Определение индекса Симпсона является результатом случайного отбора проб, поэтому он имеет дисперсию, которую можно определить через параметр θ:

$$V(D_s)=\frac{2\theta}{(1+\theta)^2(2+\theta)^2(3+\theta)}. \quad (5)$$

В свою очередь, дисперсия параметра θ может быть вычислена по формуле:

$$V(\theta)=\frac{2\theta(1+\theta)^2}{(2+\theta)(3+\theta)}. \quad (6)$$

Хуббелл определил фундаментальное число биоразнообразия как безразмерную величину. Однако в выражении $\theta=2*J_M*\nu$ параметр ν представляет число новых видов, которое появляется на каждое событие рождения, что имеет размерность [вид/экземпляр]. Параметр J_M представляет либо размер популяции [число экземпляров], либо число рождений на каждое поколение [число экземпляров/генерация]. Таким образом, θ имеет размерность либо [вид], либо [вид/генерация]. Следовательно, θ является альтернативным представлением числа видов (Ricklefs, 2003). Между параметром θ, числом экземпляров в метасообществе J_M и числом видов существует функциональная связь:

$$S(\theta)\approx 1+\theta\ln(1+(J_M-1)/\theta). \quad (7)$$

Когда J_M велико, а число видов существенно выше единицы, выражение может быть упрощено:

$$S(\theta)\approx\theta\ln(J_M/\theta), \quad (8)$$

что эквивалентно $S\approx 2*J_M*\nu\ln(2\nu)$. Соответственно, средняя продолжительность жизни видов приблизительно равна $S/J_M*\nu$ генераций, что также может быть представлено как $-2\ln(2\nu)$. Таким образом, средняя длительность жизни видов в сообществе обратно зависит от натурального логарифма скорости возникновения в сообществе новых видов.

С помощью приведенных моделей был проведен анализ структуры животного населения почвы центральной поймы р. Самара-Днепровская в условиях экспериментального загрязнения почвы никелем и свинцом. Результаты приведены в табл. 1.

В сообществах почвенных животных в апреле 2004 г. фундаментальное число биоразнообразия имеет наибольшее значение в контрольных условиях. При нарастании загрязнении почвы, которое вызвано как свинцом, так и никелем, прослеживается четкая тенденция в снижении фундаментального числа биоразнообразия. Эта тенденция является дозо-зависимой: в целом, при более высоком уровне загрязнения степень снижения разнообразия проявляется в большей мере. В октябре 2004 спустя 11 месяцев после начала эксперимента в структуре сообщества загрязнение проявляется уже только при уровне загрязнения 5 ПДК, что справедливо для обоих токсикантов.

Таблица 1. Синэкологические характеристики комплекса почвенных беспозвоночных центральной поймы р.Самара-Днепровская в условиях экспериментального загрязнения среды никелем и свинцом в апреле 2004 г. (период экспозиции – 5 месяцев)

Параметры	*Ni*				*Pb*				*Контроль*	
	I		II		I		II			
	А	Б	А	Б	А	Б	А	Б	А	Б
Θ	4,84	5,30	2,99	4,71	3,16	4,56	3,85	4,08	5,56	7,83
Var(Θ)	2,58	2,36	1,43	2,14	2,24	2,71	2,18	1,78	2,67	3,35
Θ_s	5,13	4,49	2,18	3,90	4,16	5,55	4,00	3,00	5,42	7,70
α	0,11	0,09	0,15	0,25	0,07	0,12	0,17	0,136	0,06	0,05
β	0,02	0,03	0,00	0,00	0,00	0,02	0,03	0,196	0,04	0,03
x	0,84	0,87	0,85	0,54	0,98	0,81	0,76	0,880	0,94	0,94
Ds	0,84	0,82	0,69	0,80	0,81	0,85	0,80	0,75	0,84	0,89
V(Ds)	0,028	0,025	0,050	0,029	0,047	0,030	0,037	0,035	0,023	0,014
S	15	16	18	18	15	13	16	18	18,00	21
A	150	130	46	103	139	64	54	52	228	238
S(Θ)	18	18	9	16	13	13	11	12	22	28
LS	6,87	6,40	5,47	6,17	7,57	5,28	5,28	5,09	7,43	6,83

Условные обозначения: Θ, Var(Θ), α, β, x – оценки параметров распределения обилия видов почвенных беспозвоночных в соответствии с моделью, Θ_s – оценка Θ на основе индекса Симпсона, A – обилие, экз./м^2, S – число видов, S(Θ) – оценка числа видов, Ds – индекс Симпсона, V(Ds) – дисперсия Ds, LS – средняя продолжительность жизни в сообществе (число генераций); I – уровень загрязнения 2 ПДК, II – 5 ПДК, А – вариант без изоляции; Б – вариант с изоляцией.

Меры разнообразия сообщества – фундаментальное число разнообразия и индекс Симпсона демонстрируют тесную корреляцию при токсикогенных изменениях в структуре сообщества ($Ds=0.031\Theta+0.67$, $R^2=0.58$ – весной; $Ds=0.04\Theta+0.62$, $R^2=0.55$ – осенью), что отражает тенденцию разнообразия сообществ педобионтов к снижению при загрязнении почвы тяжелыми металлами.

Таблица 2. Синэкологические характеристики комплекса почвенных беспозвоночных центральной поймы р.Самара-Днепровская в условиях экспериментального загрязнения среды никелем и свинцом в октябре 2004 г. (период экспозиции – 11 месяцев)

Параметры	*Ni*				*Pb*				*Контроль*	
	I		II		I		II			
	А	Б	А	Б	А	Б	А	Б	А	Б
Θ	6,07	3,65	4,79	4,73	4,90	4,65	3,85	4,08	5,09	5,58
Var(Θ)	2,68	2,25	2,08	2,05	2,20	2,46	1,69	1,79	2,25	3,00
Θ_s	5,45	4,19	3,74	3,65	4,04	4,76	2,77	3,00	4,19	6,47
α	0,06	0,14	0,08	0,12	0,08	0,10	0,13	0,14	0,08	0,07
β	0,10	0,20	0,05	0,23	0,04	0,25	0,19	0,20	0,05	0,10
x	0,94	0,90	0,92	0,90	0,91	0,95	0,90	0,88	0,92	0,95
Ds	0,85	0,81	0,79	0,79	0,80	0,83	0,74	0,75	0,81	0,87
V(Ds)	0,020	0,040	0,028	0,029	0,027	0,029	0,037	0,035	0,026	0,023
S	21	22	22	21	23	15	21	21	32	22
A	152	175	119	113	119	107	89	79	174	147
S(Θ)	21	15	17	16	17	16	13	13	19	19
LS	6,44	7,74	6,42	6,35	6,38	6,27	6,28	5,93	7,06	6,54

Условные обозначения: см. табл. 1

Значения фундаментального числа разнообразия Θ, которые найдены двумя способами – на основании модели (1) распределения обилия видов и на основании индекса Симпсона (4) тесно коррелированны между собой ($\Theta s= 0.97\Theta$, $R^2=0.76$ – весной; $\Theta s= 0.89\Theta$, $R^2=0.53$ – осенью), что подтверждает гипотезу о функциональной связи этих двух индексов.

Демографические характеристики животного населения описываются параметрами α, β, x.

Отношение процессов рождаемости и смертности определяется параметром x. Во всех вариантах этот параметр меньше 1, что свидетельствует о преобладании процессов смертности над рождаемостью. У большинства представителей почвенной мезофауны жизненный цикл занимает период от нескольких месяцев до нескольких лет и период размножения длится относительно короткий период времени по отношению к длительности всего жизненного цикла. Смертность же имеет место на протяжении всего жизненного цикла популяции. Поэтому отношение рождаемости к смертности вне периода размножения закономерно ниже единицы. Между разнообразием и параметром x существует положительная связь ($x= 0.03\Theta+0.68$, $R^2=0.11$ – весной; $x= 0.022\Theta+0.81$, $R^2=0.51$ – осенью). Это свидетельствует о том, что в ответ на загрязнение почвы происходит снижение разнообразия сообщества почвенных животных за счет увеличения смертности почвенных животных.

Параметр распределения обилия видов α, который характеризует активность процессов иммиграции, увеличивается при нарастании загрязнения и снижении разнообразия сообщества ($\alpha= -0.03\Theta+0.27$, $R^2=0.40$ – весной; $\alpha= -0.037\Theta+0.28$, $R^2=0.86$ – осенью).

Параметр β указывает на активность процессов эмиграции. Между этим параметром и другими характеристиками сообщества нельзя установить однозначной зависимости. По всей видимости, уровень эмиграции, который существует в данных экспериментальных условиях, не может быть полностью охарактеризованным выбранным нами методом.

Оценка количества видов, которая сделана на основании модели (1) по формуле (8) совпадает с динамикой количества видов, обнаруженных в пробах, но практически всегда ниже экспериментальных данных. Очевидно, что не все виды, которые обнаружены в пробах, соответствуют предположениям теории нейтральности, на основе которой получена модель (1). Основным предположением теории является эквивалентность видов в демографическом отношении. Такое ограничение правомерно по отношению к однородным в экологическом и таксономическом отношении сообществам живых организмов. Животное население почвы связано общностью среды обитания, но демонстрирует широкое разнообразие форм и таксономического состава. Поэтому тот факт, что некоторые виды не вписываются в рамки модели, выведенной из гипотезы нейтральности видов, является вполне закономерным. С другой стороны, общая картина динамики сообщества, которая становится видна с помощью модели (1) является вполне информативной и заслуживает доверия.

Продолжительность жизни почвенных животных, которая рассчитана из модели (1) по формуле $S/J_M*\nu$ приведена в единицах, равных одной генерации. Длительность поколений почвенных животных различна у каждого вида и изменяется от нескольких недель (энхитреиды, некоторые виды дождевых червей) до нескольких месяцев и лет. В среднем эту цифру можно принять равной 1 году, так как период активности у многих почвенных животных имеет место один раз в годы и совпадает с весной. Расчет продолжительности жизни почвенных животных в центральной пойме р.Самара показал, что этот параметр, в среднем, составляет 6.83-7.43 периодов генерации весной и 6.54-7.06 осенью. При загрязнении почвы тяжелыми металлами продолжительности жизни животных снижается. Снижение длительности жизни связано с уровнем токсической нагрузки.

РЕЗЮМЕ

У роботі наведені основні результати теорії нейтрального розмаїття. Зроблено спробу застосувати ці результати для аналізу структури комплексів ґрунтових тварин в умовах експериментального забруднення ґрунту важкими металами. Зазначений підхід є продуктивним для оцінки угруповань мешканців ґрунту.

Ключові слова: теорія нейтрального розмаїття, ґрунтова мезофауна, демографія, міграція.

SUMMARY

The main results of the neutral diversity theory have been presented in the work. These results were attempted to analyze the structure of the soil animals complexes under experimental heavy metal contamination condition. This approach has been demonstrated to be useful for soil animal community assessing.

Key words: neutral diversity theory, soil mesofauna, demography, migration.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Etienne, R.S. & Olff, H. A novel genealogical approach to neutral biodiversity theory // Ecology Letters. – 2004. – Vol.7. – P.170-175.

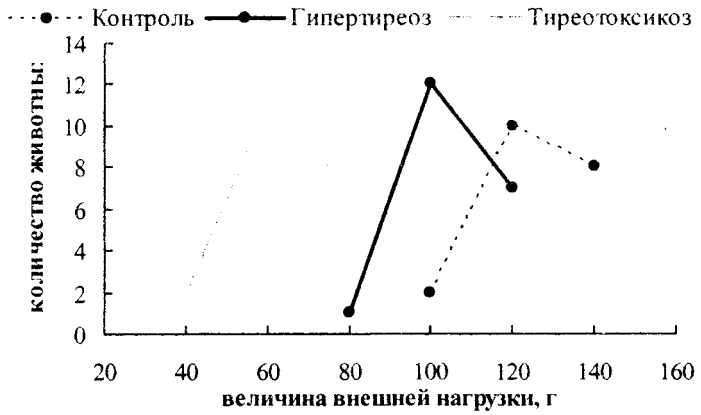


Рис. 1. Распределение животных в группах с различным тиреоидным статусом (контроль, умеренный гипертиреоз и тиреотоксикоз) в зависимости от величины оптимальной нагрузки для передней большеберцовой мышцы (количество животных в каждой группе равно 20)

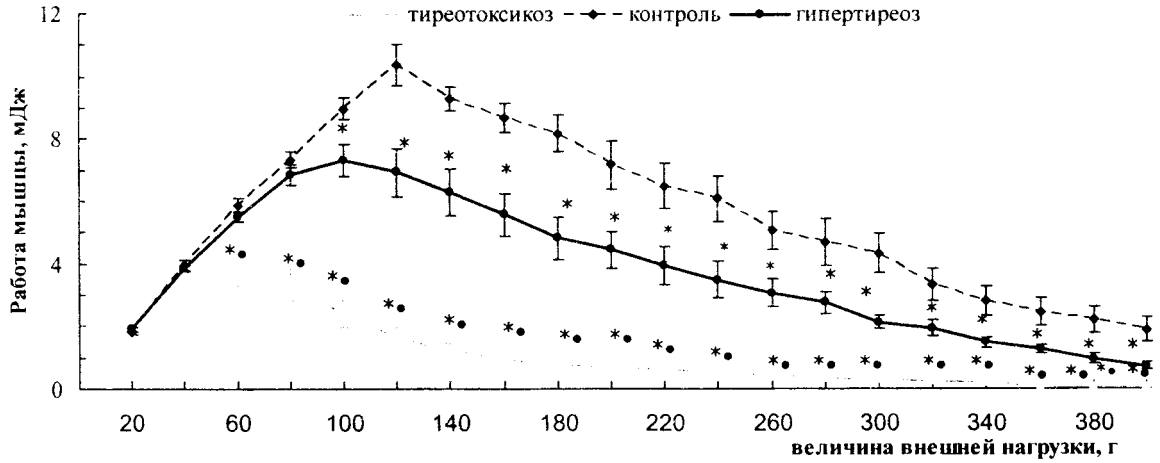


Рис. 2. Зависимость величины работы передней большеберцовой мышцы эутиреоидных (n=20), гипертиреоидных (n=20) и тиреотоксикозных (n=20) крыс от внешней нагрузки.

Примечание: * – различия статистически значимы по сравнению с уровнем контроля (P<0,05);
• – различия статистически значимы по отношению к соответствующим значениям гипертиреоидных крыс (P<0,05)

Во-вторых, работа передней большеберцовой мышцы гипертиреоидных и тиреотоксикозных животных претерпевала неоднозначные изменения в диапазоне малых, средних и больших внешних нагрузок (см. рис. 2). Так, при использовании в эксперименте малых нагрузок (20-80 г для гипертиреоидных и 20-40 г для тиреотоксикозных животных) величина внешней работы, выполняемой мышцей опытных крыс, не отличалась от таковой контроля, несмотря на снижение мышечной массы. Причем масса передней большеберцовой мышцы гипертиреоидных (147±3,0 мг/100 г массы тела) и тиреотоксикозных (127±3,1 мг/100 г массы тела) животных оказалась меньше (P<0,01) эутиреоидного уровня (164±4,3 мг/100 г массы тела) соответственно на 10±2,0% и 22±2,4%, что свидетельствует в пользу развития атрофических изменений в ней. Таким образом, при неизменном общем уровне внешней работы мышцы гипертиреоидных и тиреотоксикозных крыс величина работы, выполняемой отдельными мышечными волокнами, а, следовательно, и развиваемая ими сила несколько возрастали. В результате этого силовые характеристики всей мышцы в диапазоне малых нагрузок не претерпели существенных изменений, несмотря на имевшее место уменьшение мышечной массы.

В случае применения в эксперименте средних и больших нагрузок (100-400 г для гипертиреоидных и 60-400 г для тиреотоксикозных крыс) и у гипертиреоидных, и у тиреотоксикозных животных наблюдалось уменьшение величины внешней работы передней большеберцовой мышцы по сравнению с эутиреоидным уровнем (P<0,05), свидетельствующее в пользу снижения ее силовых характеристик. Причем отмеченное снижение мышечной работы носило более выраженный характер у крыс с тиреотоксикозом и нарастало по мере увеличения массы поднимаемого мышцей груза. Если процентное умень-

УДК 631.8:547.992

ГУМИНОВЫЕ ВАНАДИЙСОДЕРЖАЩИЕ ПРЕПАРАТЫ КАК СТИМУЛЯТОРЫ РОСТА РАСТЕНИЙ

Ю.Н.Зубкова, Н.Б.Узденников, И.А.Рыктор, А.Л.Антонова, А.В.Бутюгин

В последние годы интерес к изучению роли ванадия в живых организмах неуклонно растет. Ванадий участвует в ферментативных процессах, влияет на важнейшие физиологические системы и метаболические процессы в организмах растений, животных и человека [1-7]. Установлено, что препараты ванадия проявляют биоактивные и фармакологические свойства: оказывают подобное инсулину антидиабетическое и антигипертоническое влияния, проявляют противоопухолевую активность, стимулируют работу сердечно-сосудистой системы, купируют развитие обширного инфаркта миокарда [7,8-13].Выявлено положительное влияние ванадия в составе кормовых добавок в животноводстве для повышения привесов и устойчивости к вирусным заболеваниям [14,15]. Исследованиям физиологической роли ванадия и механизмов его действия в растительной клетке до недавнего времени не уделялось такого внимания, как другим жизненно важным микроэлементам. Ванадий является поливалентным металлом. И, хотя содержание последних в растительном организме, как правило, количественно меньше тех металлов, которые участвуют в обмене веществ без изменения валентности, значение их очень велико [16]. Они легко образуют комплексные соединения с различными группами веществ клетки, которые обладают различными значениями окислительно-восстановительного потенциала (ОВП, E_0'). С участием таких соединений, входящих в состав ферментов, осуществляется регулирование важнейших процессов обмена веществ растения: ассимиляции углекислоты, восстановления соединений серы и азота, окисления веществ в процессах брожения и дыхания, выделения кислорода при фотосинтезе [17]. Расчеты зависимости содержания ванадия в растениях степных, луговых и агрономических цинозов от его количества в почвах показывают, что он является элементом низкой интенсивности поглощения. Содержание ванадия в надземной массе кормовых растений находится в пределах нормальных концентраций [5]. Соли ванадия положительно влияют на процесс азотфиксации и необходимы для развития высших и низших растений. Ванадий по своим физиологическим функциям наиболее сходен с молибденом [18-20]. Оба элемента усиливают фиксацию атмосферного азота клубеньковыми бактериями бобовых растений; действие ванадия на морфогенез и продуктивность бобовых культур в целом аналогично влиянию молибдена; оба микроэлемента являются катализаторами при окислении различных органических соединений и т. д. Ванадий оказывает существенное влияние на активность рибонуклеазы рибосомной фракции проростков гороха (снижение активности до 30%) [20]. Рибосомная фракция шестидневных проростков гороха, обогащенная молибденом и ванадием, имела активность порядка 16,3 и 12,1 условных единиц (усл. ед.) соответственно, при контрольных показателях 22,3 усл. ед. активности фермента. Рибонуклеаза по своей химической природе является гистоноподобным белком. Последние оказывают ингибирующее влияние на клеточный метаболизм и, в первую очередь, на процессы синтеза белка. Таким образом, присутствие ионов микроэлементов ванадия и молибдена устраняет белокингибирующие процессы. Предпосевная обработка растений молибденом и ванадием (как и некоторыми другими микроэлементами) вызывает депрессию ядерных структур на стартовых этапах прорастания, что сопровождается уменьшением количества гистонов в хроматине клеточных ядер [20]. В результате происходит повышение уровня белкового обмена, что приводит к усилению превращения запасных и накоплению структурных и каталитических белков, повышению уровня окислительно-восстановительных процессов и активности ферментов (дегидраз, липазы, протеолитических и др.), интенсивному образованию эндогенных метаболитов. Интеграция процессов способствует увеличению энергии прорастания и всхожести семян. Один из вероятных механизмов подобного действия микроэлементов на ранних стадиях онтогенеза – участие в процессах, связанных с нарушением физиологического покоя клетки путем изменений в структурах субклеточных единиц.

Исследовано влияние ванадата аммония на растения томата и на процесс отрождения инвазивных личинок второй возрастной стадии нематоды meloidogy ne arenaria [21]. В дозе 0,13мг/100мл воды ванадий позитивно влиял на рост и развитие растений, а в дозах выше 0,25 мг/100мл воды проявлял токсический эффект. Во всех вариантах опыта отрождение инвазивных личинок значительно ингибировалось.

Из литературы известно, что в качестве стимулятора-адаптогена растений применяется препарат на основе пентоксида ванадия V_2O_5 [22]. Получены положительные результаты по ростовым показателям бобовых (горох), учитывая высокую отзывчивость азотфиксирующих культур к молибдену и ванадию. Наиболее эффективен данный препарат на декоративных и промышленных культурах, растущих в условиях техногенного загрязнения. В таких условиях ванадий существенно повышает защитные силы растительных организмов, стимулирует синтетические, метаболические, обменные функции организма. Полезное действие на организмы поливалентных металлов усиливается при связывании их в комплексы

© Зубкова Ю.Н., Узденников Н.Б., Рыктор И.А., Антонова А.Л., Бутюгин А.В.

с органическими лигандами [12,23]. Поэтому в сравнении с неорганическими ванадиевыми соединениями преимущества имеют гуминовые ванадиевые производные [16]. Характерной особенностью гуминовых веществ (ГВ) является их способность к восстановлению ионов ряда элементов до более низких степеней окисления и последующему связыванию восстановленных форм в комплексные соединения [16,24]. Восстановительные свойства ГВ по отношению к металлам, имеющим несколько степеней окисления, были обнаружены в условиях эксперимента in vivo и in vitro [25-27]. Вместе с тем известно, что металлы, имеющие более высокие степени окисления, как правило, более токсичны для организмов всех уровней филогенеза [28-30]. Известно также, что ионы ванадия с высшей степенью окисления обладают большей токсичностью [12,16]. Важным фактором является то, что водорастворимые комплексные соединения гуминовых и фульвокислот с ванадием содержат два биоактивных агента: гуминовую составляющую, чья биоактивность подтверждена многолетними исследованиями, и микроэлемент ванадий. В работах [31-32] представлены данные о восстановлении ванадия (+5) до ванадия (+4). В окислительных условиях ванадий существует в виде ванадат-ионов (VO_3^-), а в составе фульватных комплексов – в виде ионов VO_2^+(степень окисления +4), что доказано методом электронного парамагнитного резонанса [32]. Было установлено [31], что 1г ГК восстанавливает около 0,03 ммоль ванадия из анионной формы VO_3^- до VO_2^+. Эффективность восстановления зависит от соотношения в растворе ФК и VO_3^-. При соотношении компонентов 10:1 в растворе восстанавливается до 50% исходного количества VO_3^-.

Цель настоящей работы – получение новых ростстимулирующих препаратов на основе гуминовых и ванадиевых веществ и изучение их биоактивных свойств.

Для получения ванадийсодержащих гуминовых препаратов (ГВП) с различной валентностью микроэлемента использовали ванадийные соединения: полуторный оксид ванадия V_2O_3 (+3); ванадил VO_2 (+4) или соли ванадила VO^{2+}; кислотообразующий оксид ванадия (+5) или соли – ванадаты. Буроугольные гуминовые кислоты получали по стандартной технологии [33]. Отработаны методики получения различных ванадийсодержащих гуминовых препаратов, представляющих собой комплексы буроугольных кислот с ванадийными соединениями разной степени окисления ванадия (+5,+4,+3) в водном растворе (при pH=8): ванадийсодержащая гуминовая кислота (V^{+5}) – ГV5; ванадийсодержащая гуминовая кислота (V^{+4}) – ГV4; ванадийсодержащая гуминовая кислота (V^{+3}) – ГV3. В лабораторных условиях исследовано физиологическое влияние полученных препаратов на растения.

Проведены опыты по оценке ростстимулирующей активности растворов буроугольных гуминовых ванадийсодержащих препаратов с разной степенью окисления ванадия: ГV5 (+5), ГV4 (+4), ГV3 (+3). Растительными объектами эксперимента были горох (Pisum sativum) Адагумский, райграс (Arrhenatherum elatius), пшеница (Triticum aestivum) Донецкая 48. Семена замачивали на 48-72ч. в растворах ГV5, ГV4, ГV3 с концентрацией от 10^{-7}% до 10^{-4}% массовых, приготовленных путем разбавления из исходных растворов. Нижний предел концентраций меньше значений ПДК ванадия в питьевой воде. Проросшие семена выращивали на растворах с концентрациями 10^{-7}% и 10^{-4}% в течение 20 дней, а также в почве с трехкратными поливами препаратами соответствующей концентрации. Контроль – вода, раствор сравнения – пентоксид ванадия с концентрациями 10^{-6}% и 10^{-3}%. Проведено 6 серий опытов в 3-х кратной повторности. Эффективность препаратов в качестве стимуляторов оценивали на основании показателей сухой массы проростков по общепринятым методикам [34].

На рис. 1-4 приведены результаты опытов на горохе (при концентрациях стимуляторов: а – 10^{-6}, в-10^{5}, с – 10^{-4}, d – 10^{-3} %).

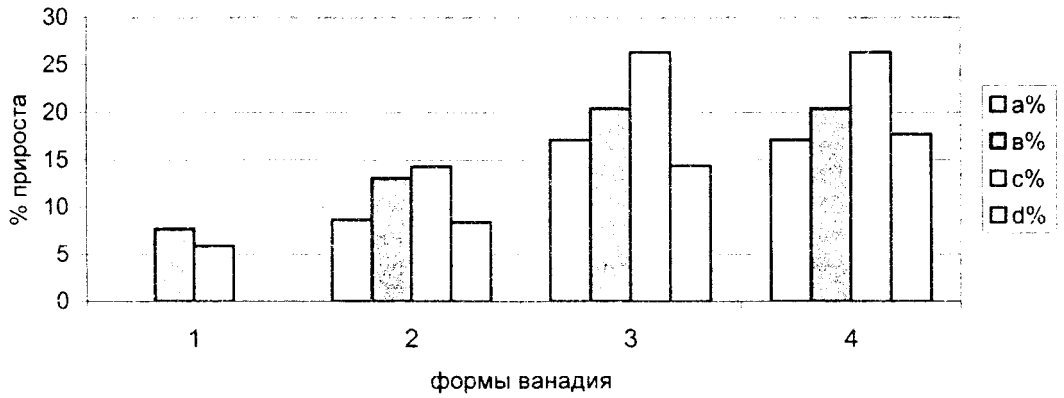


Рис. 1. Прирост сухой массы корней гороха, выращенного в почве при обработке различными формами и концентрациями гуматванадиевых стимуляторов: 1- эталон (ванадат): 2 – ГV3; 3 – ГV4; 4 – ГV5

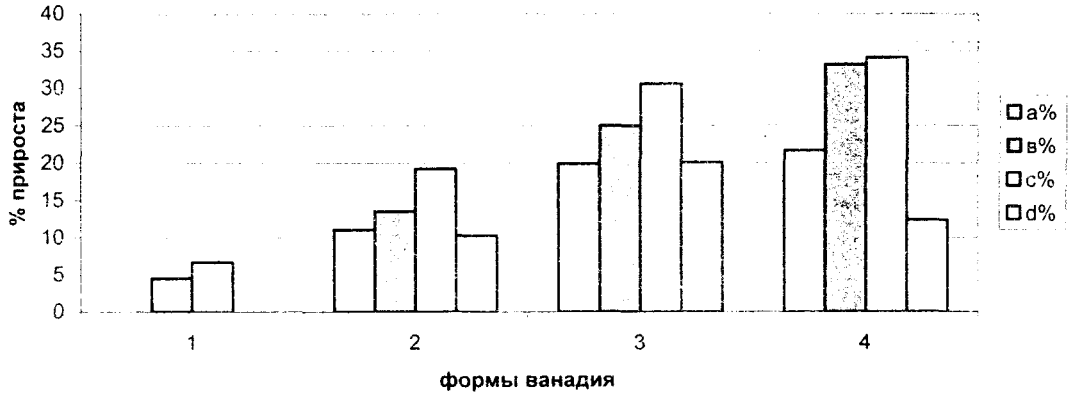


Рис. 2. Прирост сухой зеленой массы гороха, выращенного в почве при обработке различными формами и концентрациями гуматванадиевых стимуляторов: 1- эталон (пентоксид ванадия): 2 – ГУ3; 3 – ГУ4; 4 – ГУ5

Прирост сухой массы надземной части и корней составляет 13,6-19,2% и 13,1-14,3% соответственно.

Показатели прироста сухой массы проростков гороха, обработанных ГУ4, были значительно выше, чем при использовании ГУ5. Лучшие результаты по накоплению массы проростков получены при концентрациях 10^{-6}% -10^{-4}%: прирост сухой масса надземной части 19,9-30,6%, корней – 17,1-26,3%.

Аналогичные результаты получены при использовании растворов ГУ3 с концентрациями 10^{-6}% -10^{-4}%. Приросты сухой массы надземной части гороха соответствовало 21,7-34,1%, для корней – 17,1-26,3%.

При использовании растворов пентоксида ванадия (раствор сравнения или эталон) с концентрациями 10^{-6} -10^{-3}% показатели прироста сырой и сухой массы проростков гороха были в пределах 4,3-8,9% к контролю, что значительно ниже показателей опытных растений, обработанных растворами гуминовых ванадийсодержащих препаратов. Все гуминовые ванадийсодержащие препараты оказывают более сильное стимулирующее влияние на горох при замачивании и последующих поливах в почве. Наиболее физиологически активными являются препараты, содержащие трех- и четырехвалентный ванадий.

В опыте с выращиванием гороха на растворах препаратов ГВП с концентрациями 10^{-7} -10^{-4}% во всех вариантах опыта проявлялся ростстимулирующий эффект (рис.3,4), значительно превышающий показатели при использовании раствора сравнения.

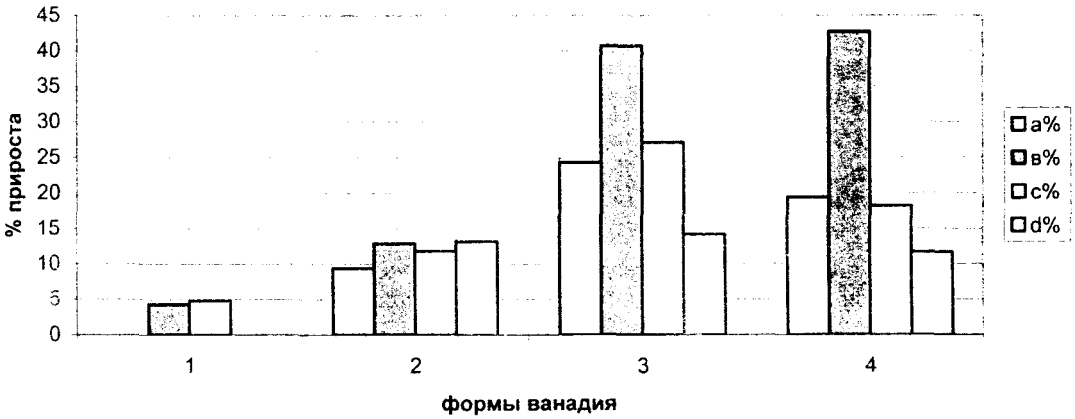


Рис.3. Прирост сухой зеленой массы гороха при выращивании на растворах различных форм и концентраций гуматванадиевых стимуляторов: 1- эталон (пентоксид ванадия): 2 – ГУ3; 3 – ГУ4; 4 – ГУ5

Максимальные показатели накопления сухой массы проростков получены при использовании 10^{-6} -10^{-4}%-ных растворов исследованных препаратов.

При использовании растворов ГУ5 с концентрациями 10^{-6} -10^{-4}% показатели прироста сырой массы зелени составили 15,5-19,5%, корней – 6,9-10,2%; приросты сухой массы зелени составляли 9,8-12,9%, корней – 4,3-6,0%.

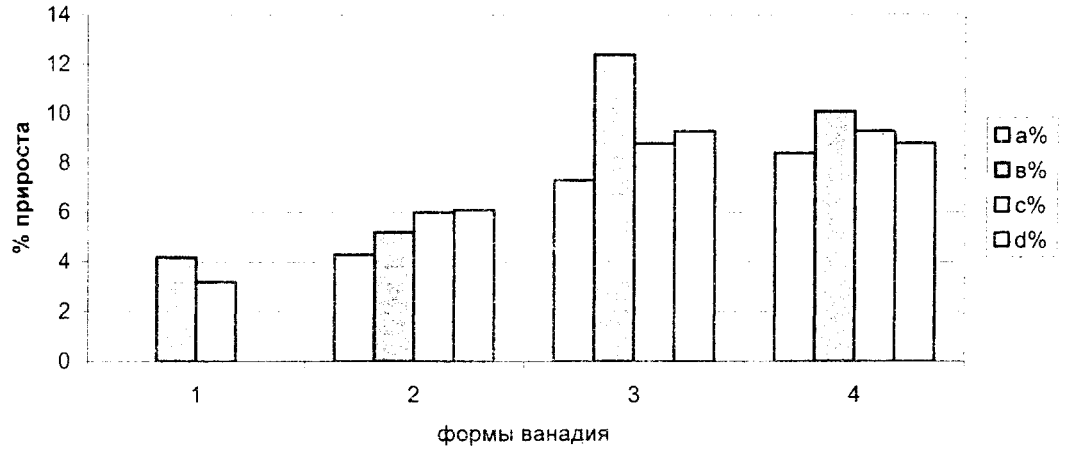


Рис. 4. Прирост сухой массы корней гороха при выращивании на растворах различных форм и концентраций гуматванадиевых стимуляторов: 1- эталон (пентоксид ванадия): 2 – ГУ3; 3 – ГУ4; 4 – ГУ5

Применение на горохе растворов ГУ4 в значительной степени стимулировало накопление массы проростков. В условиях лабораторного опыта получены достаточно высокие показатели сырой и сухой массы опытных растений гороха – до 50-ти% выше контрольных показателей. Прирост сырой массы зелени соответствует 35,5-52,3%, корней – 15,8-24,5%. Приросты сухой массы зелени составляют 24,3-40,7%, корней – 7,3-12,4%.

Аналогичные результаты получены при использовании 10^{-6} -10^{-4}%-ных растворов ГУ3 – это одни из лучших показателей накопления массы проростков. Приросты сырой зеленой массы составляют 45,0-64,8%, корней – 17,9-20,1%. Приросты сухой массы зелени составляют 18,2-42,0%, корней – 8,4-10,1%.

Таким образом, наиболее эффективными стимуляторами роста на горохе являются соединения, содержащие ванадий с более низкой степенью окисления – ГУ3, ГУ4 .

Влияние гуминовых ванадийных препаратов изучено также на райграсе, который широко используется при озеленении газонов (в зеленом строительстве). Семена, замоченные на 48ч. в растворах с концентрациями 10^{-7} -10^{-3}%, выращивали в почве в течение 20-ти суток с трехкратным поливом растворами соответствующей концентрации. Данные по приростам массы проростков (рис.5,6) свидетельствуют о повышении ростовых показателей райграса, обработанных различными гуминовыми препаратами ванадия. Наилучшие результаты по накоплению массы опытных проростков получены при обработке растворами препаратов с концентрациями 10^{-6} -10^{-4}%.

При использовании растворов ГУ5 с концентрациями 10^{-6} -10^{-4}% показатели прироста сырой массы зелени составили 9,4-13,2%, корней – 8,7-13,3%; приросты сухой массы зелени составляли 5,3-9,4%, корней – 4,8-7,4%.

Использование препаратов ГУ4 и ГУ3 на райграсе в большей степени, чем ГУ5 стимулировало накопление массы проростков. Обработка райграса 10^{-6}-10^{-4}%-ными растворами ГУ4 обеспечивает увеличение прироста сырой массы проростков в пределах: надземной части – 26,7-47,3%, корней – 17,7-21,2%. Прирост сухой массы соответствует для надземной части 14,7-19,3%, корней – 7,6-9,2%. Растворы ГУ3 проявляют более высокую ростстимулирующую активность. Показатели прироста сырой массы надземной части составляют 20,7-61,1%, корней – 17,6-28,7%; приросты сухой массы надземной части соответствуют 13,9-16,4%, корней – 6,4-9,1%.

Таким образом, более эффективными стимуляторами роста на райграсе являются препараты ГУ3 и ГУ4, в сравнении с ГУ5. При использовании раствора сравнения – пентоксида ванадия с концентрациями 10^{-5} -10^{-4}% показатели прироста сырой и сухой массы проростков райграса находятся в пределах 3,8-6,9% к контролю, что значительно ниже показателей опытных растений, обработанных растворами гуминовых ванадийсодержащих препаратов.

Были проведены предварительные лабораторные опыты по оценке ростстимулирующего влияния гуминовых ванадийсодержащих препаратов на пшенице Донецкая 48. Использованы те же концентрации, способы обработки и условия выращивания, что и для гороха и райграса. Получены положительные результаты, что проявилось в увеличении массы проростков на 6,7-17,5% относительно контроля. Наличие положительного эффекта на зерновых более убедительно подтверждает преимущества использования ванадийсодержащих соединений в качестве стимуляторов роста растений именно в составе гуминовых комплексов. Известно [21,6], что ванадийные препараты менее эффективны на таких расте-

ниях как томаты и пшеница. Присутствие гуминовой составляющей в предложенных нами препаратах существенно повышает их стимулирующий потенциал.



Рис. 5. Прирост сухой зеленой массы райграса при выращивании в почве при обработке различными формами и концентрациями гуматванадиевых стимуляторов: 1 – эталон (пентоксид ванадия): 2 – ГУ3; 3 – ГУ4; 4 – ГУ5



Рис. 6. Прирост сухой массы корней гороха при выращивании в почве при обработке различными формами и концентрациями гуматванадиевых стимуляторов: 1 -эталон (пентоксид ванадия): 2 – ГУ3; 3 – ГУ4; 4 – ГУ5

Полученные нами результаты согласуются с известными данными [32] о роли гуминовых веществ в жизнедеятельности растений. Накоплен материал исследований, представляющий научную и практическую ценность в плане использования препаратов на основе гумусовых кислот и их отдельных фракций в качестве стимуляторов роста, адаптогенов, иммуномодуляторов [35]. В результате повышается интенсивность энергетических, фотосинтетических, ассимиляционных, синтетических и обменных процессов в растении, возрастает устойчивость организмов к биотическим и абиотическим стрессовым факторам путем интенсификации реакций неспецифической адаптации. Присутствие буроугольных гуминовых кислот в водорастворимом ионодисперсном состоянии является главным фактором повышения ростстимулирующей активности ванадийсодержащих гуминовых препаратов в сравнении с неорганическими ванадиевыми соединениями, что обусловлено эффектом синергизма микроэлемента с природным органическим лигандом.

Полученные нами данные свидетельствует о более высокой эффективности действия в качестве стимуляторов роста водорастворимых гуминовых комплексов с ванадием, имеющим степени окисления (+4) и (+3) в сравнении с ванадием (+5). Подобный эффект обусловлен, вероятно, более высокими восстановительными способностями ванадил-иона со степенью окисления (+4) и иона со степенью окисления (+3) по сравнению с пятивалентными ионами ванадата [16,17]. Восстановительные способности ванадийсодержащих гуминовых комплексов создают условия для активации деятельности ферментативных систем и оптимизации концентраций жизненноважных метаболитов на органоидном, субклеточном, клеточном и организменном уровнях [30]. Молекулы гуминовых веществ имеют единую систему скоординированных полисопряженных связей. Повышение ростстимулирующей активности соединений с восстановленными формами ванадия, по-видимому, связано с повышением уровня энергетических и метаболических процессов за счет взаимодействия делокализованных электронов сопряженных молекул ГВ и ионов переменной валентности. Более высокая ростстимулирующая способность восстановленных

форм ванадия может быть также обусловлена естественными механизмами снижения токсичности веществ, которые в зависимости от валентности и концентрации проявляют ингибирующее либо стимулирующее влияние на организм [36]. Гуминовые вещества является универсальным агентом, способным к восстановлению ионов поливалентных элементов до более низких степеней окисления и последующему связыванию восстановленных форм в комплексные соединения [16]. Причину повышения физиологической активности гуминовых ванадийсодержащих препаратов в связи с понижением степени окисления ванадия можно рассматривать как следствие природного универсального механизма повышения стимулирующих свойств элементов, обладающих более высоким восстановительным потенциалом, что более востребовано в процессах жизнедеятельности растений.

РЕЗЮМЕ

Вивчена біоактивність нових стимуляторів росту на основі гуматів з бурого вугілля та неорганічних сполук ванадію різної валентності. Показана позитивна ефективність препаратів на гороху, райграсу та пшениці.

SUMMARY

A bioactive property of the new stimulators from brown coal and vanadium compounds with different valence was studying. Efficiency preparations on the peas, rye grass and wheat was shown.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Биологическая роль микроэлементов и их применение в с/х и медицине. – М.: Наука, 1974. – 438 с.
2. Биологическая роль микроэлементов. – М.: Наука, 1983. – 237 с.
3. Davison A., Hulley Ph. Grown factor like actions of vanadium – redox reactivity and protein tyroaine phosphatases // 6 Conference of the International Society for Trace Tlement Research in Humans (ISTERH), Quebec City, Sept. 7-12, 2002). J.Trace Elem. Exp. Med. – 2003. – 16. – №2-3. – P.116.
4. Obzera A. Vanadij v ziven organizmu in farmaciji. // Farm. vestn. – 2003. – 54. – №4. – P.713-718.
5. Кашин В.К., Иванов Г.М. Ванадий в растениях Забайкалья // Агрохимия. – 2005. – №3. – С.67-73.
6. Ross M. Weleh. Vanadium uptake by plaunts // Plant Physiol. – 1973. – 51. – P.828-832.
7. Anke M., Arnhold W., Angelow L., Anke S. Essentiality of aluminium, cadmium, rubidium, titanium and vanadium in animals and intake of these ultratrace elements by humans // J.Trace Elem. Exp. Med. – 2003. – 16. – №2-3. – P.110-111.
8. Gummow B., Botha C.J., Noozdhuizen J.P. The public health implications of farming cattle in areas with high background concentrations of vanadium // Preventive veterinary medicine. – 2005. – V.72. – P.281-290.
9. Coderre L., Srivastava A.K. Vanadium and the cardiovascular functions // Can. J. Physiol. and pharmacol. – 2004. – V.82. – №10. – P.833-839.
10. Bhanot S., McNeill J.U. Vanadyl sulfate lowers plasma insulin and blood pressure in spontaneously hypertensive rats // Hypertention. – 24. – P.625-632.
11. Genet S., Kall R.K., Baguer N.Z. Alterations in antioxidant enzymes and oxidative damage in experimental diabetic rat tissues: effect of vanadate and fenugreek // Mol. Cell. Miochem. – 2002. – 236. – P.7-12.
12. Swarup G., Cohen S., Garbers D.L. Inhibition of membrane phosphotyrosyl-protein phosphate activity by vanadate // Biochem. Biophys. Res. Commun. – 1982. – 107. – P.1104-1109.
13. Srivastava A.K., Mendi M.Z. Insulino-mimetic and anti-diabetic effects of vanadium compounds // Diabetic. Med. – 2004. – 22. – P.2-13.
14. Srivastava A.K., St-Louis J. Smath muscle contractivity and protein tyrosine phosphorylation // Mol. Cell. Biochem. – 1997. – 176. – P.47-51.
15. Krumhar Kim Carleton, Katke Jeffrey J. Composition and method for improved carbohydrate management in mammals // Metagenics. Inc. №09/633926/ 04/03/03/ НПК 514/188 U.S.
16. Линник П.Н., Васильчук Т.А., Линник Р.П. Гумусовые вещества природных вод и их значение для водных экосистем // Годробиологический журнал. – 2004. – Т.40. – №1. – С.81-107.
17. Бойченко Е.А. Соединения поливалентных металлов в эволюции метаболизма растений // Биологическая роль микроэлементов и их применение в с/х и медицине. – М.: Наука. – 1974. – С.48-60.
18. Петербургский А.В., Тормасова Е.Е. Влияние ванадия на урожай, азотонакопление и химический состав гороха на дерново-подзолистых почвах / Биологическая роль микроэлементов и их применение в с/х и медицине. – М.: Наука, 1974 – С.256-262.
19. Микроэлементы: поступление, транспорт и физиологические функции в растениях. – К.: Наукова думка, 1987. – 184 с.
20. Власюк П.А. Значение микроэлементов для стартово-пусковых механизмов прорастания семян / Биологическая роль микроэлементов и их применение в с/х и медицине. – М.: Наука. – 1974. – С.41-48.
21. Salkova D., Baicheva P., Alexandrova R. Investigations of the vanadium influence on hosts of Meloidogyne (Goeldi, 1887) and on hatching of the invasive larvae-L2 // Exp. Pathol. and Parasitol. – 2002. – 5. – №8. – P.41-43.
22. Авторское свидетельство СССР № 474327, кл. A01 N 5/00, 1975.
23. Нечаева С.В., Мазо В.К., Голубев М.А и др. Способ получения спирулины, богащенной ванадием. Пат. 2198215 Россия, МПК C12N 1/12. ООО Науч.-произв. предприятие «Биотика-С». №2000132047/13. Заявл. 12.21.00. Опубл. 02.10.03. Бюл. №4. RU.

24. Варшал Г.М., Велюханова Т.К., Кощеева И.Л. и др. Комплексообразование благородных металлов с фульвокислотами природных вод и геохимическая роль этих процессов // Аналитическая химия редких элементов. – М.: Наука, 1988. – С.112-146.
25. Cameron A.J., Liss P.S. The stabilization of «dissolved» iron in freshwaters // Water Res. – 1984. – V.18. – №2. – P.179-185.
26. Skogerboe R.K., Wilson S.A. Reduction of ionic species by fulvic acid // Anal.Chem. – 1981. – V.53. – №2. – P.228-232.
27. Miles C.J., Brezonic P.L. Oxygen consumption in humic-colored waters by a photochemical ferrous-ferric catalytic cycle // Environ. Sci. Technol. – 1981. – V.15. – №9. – P.1089-1095.
28. Korolczuk M., Grabarczyk M. Determination of Cr (VI) in the presence of Cr (III) and humic acid by cathodic stripping voltammetry // Microchim J. 2000. – 72. – P.103-109.
29. Minelli L., Veschetti E., Giammanco S. Vanadium in Italian waters: monitoring and speciation of V (IV) and V (V) // Microchim. J. 2000. – V.67. – P.83-90.
30. Tempeton D.M. Biomedical aspects of trace element speciation // Fresenins J. Anal. Chem. – 1999. – V.363. – P.505-511.
31. Szalay A., Szilagyi M. The association of vanadium with humic acids // Geochim. Cosmochim. Acta. – 1967. – V.31. – №1. – P.1-6.
32. Wilson S.A., Weber J.N. An EPR study of the reduction of vanadium (V) to vanadium (IV) by fulvic acid // Chem. Geol. – 1979. – V.26. – №3. – P.345-354.
33. Кухаренко Т.А. О методах выделения гуминовых кислот из торфов и бурых углей // Химия твердого топлива. – 1980. – № 5. – С.87-93.
34. Починок Х.Н. Методы биохимического анализа растений. – Киев: Наукова думка, 1976. – 334 с.
35. Гуминовые удобрения. Теория и практика их применения. – Ч.7. – Днепропетровск, 1980. – 293 с.
36. Дурмишидзе С.В. Расщепление ароматического кольца некоторых экзогенных соединений в растениях. – Тбилиси: Мицниереба, 1975. – 50 с.

Надійшла до редакції 20.03.2007 р.

УДК 635.948(477.60)

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕГЕНЕРАЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ВЫСОКОДЕКОРАТИВНЫХ КУЛЬТИВАРОВ ВИДОВ РОДА *SPIRAEA* L., ПЕРСПЕКТИВНЫХ ДЛЯ ОЗЕЛЕНЕНИЯ НА ЮГО-ВОСТОКЕ УКРАИНЫ

Л.В.Хархота,
Донецкий ботанический сад НАН Украины

Введение.

Интродукция растений дает возможность расширить ассортимент новыми представителями мировых растительных ресурсов, которые в местных условиях могут использоваться с максимальным хозяйственным эффектом. В практике зеленого строительства в промышленном регионе широкое распространение, в первую очередь, получают растения со значительной устойчивостью к неблагоприятным экологическим факторам, особенностям климатических условий [1]. Но не менее важным компонентом является также и высокая декоративность зеленых насаждений, что дает возможность украсить многочисленные предприятия и заведения, создать прекрасные места для отдыха. С этой целью продолжаются работы, связанные с исследованием регенерационной способности новых для региона видов и культиваров, широко используемых в ландшафтном дизайне.

Виды рода спирея (*Spiraea* L.) всегда привлекали интродукторов изящной формой кустов, декоративной листвой, пышным цветением и своей неприхотливостью [2]. Многие из них нетребовательны к почве, морозостойкие, засухо-, дымо- и газоустойчивы, хорошо переносят условия города. Однако участие новых декоративных форм спирей в озеленении пока ограничено из-за их недостаточной изученности, недостатка сведений об их размножении.

Цель наших исследований – определение регенерационной способности высокодекоративных культиваров видов рода *Spiraea* L. Объекты исследования: культивары двух видов – спиреи серой (*Spiraea* x *cinerea* Zabel *´Grefsheim´*) и спиреи японской (*S. japonica* L.f. *´Albiflora´*, *S. japonica ´Darts Red´*, *S. japonica ´Gold flame´*, *S. japonica ´Golden Princess´*, *S. japonica ´Macrophylla´*). Изучали ризогенез стеблевых черенков названных культиваров.

Материалы и методы исследования.

Стеблевые черенки данных культиваров были получены от маточных корнесобственных растений, которые прошли первичную интродукцию и обнаружили свои высокодекоративные свойства: различные сроки и продолжительность цветения, декоративность цветков и листьев, а также неприхотливость в культуре. Сроки черенкования – Ш декада марта, II декада июня, I декада июля. В процессе исследований использовали новые модификации методики ускоренного размножения древесных растений [3]. Для стимуляции ризогенеза применяли стимуляторы роста: ИМК (β-индолилмасляная кислота), ИУК (β-индолилуксусная кислота) в концентрации 2000 мг/л – спиртовые растворы, 100 и 150 мг/л, соответственно, – водные растворы. Черенкование проводили в теплице с искусственным доувлажнением воздуха, в качестве субстрата использовали песок.

Результаты и обсуждение.

Spiraea x *cinerea* Zabel *´Grefsheim´* – кустарник до 1,0–1,5 м высотой с грациозными поникающими побегами, цветет в мае–июне белоснежными цветками, густо покрывающими побеги. Очень декоративен во время цветения, дает прекрасный весенний акцент для сада. После окончания цветения хорошо стрижется. Наиболее высокая укореняемость была отмечена у полуодревесневших черенков при использовании водных растворов ИМК и ИУК – 90 и 95%, соответственно.

S. japonica L.f. *´Albiflora´* – кустарник до 0,8 м высотой с компактной ажурной кроной. Цветет в июле–августе, но в отличие от большинства летнецветущих спирей цветки у нее белые, собранные в щитковидные соцветия. Полуодревесневшие черенки проявили ее высокую регенерационную способность: укореняемость черенков при обработке спиртовым раствором ИУК составила 90%.

S. japonica ´Darts Red´ – кустарник высотой 0,6–0,8 м. Листья ланцетные, при распускании розовато-малиновые, потом темно-зеленые с красной каемкой и прожилками, осенью – красные. Цветет с июля по сентябрь малиновыми или рубиново-красными цветками, в щитковидных соцветиях. Декоративен с весны до поздней осени. В предыдущие годы стеблевые черенки данного культивара проявляли низкую регенерацию, по сравнению с другими культиварами *Spiraea japonica*. В 2006 году после обработки полуодревесневших черенков водным раствором ИУК укореняемость их составила 100%. Черенки имели хорошо развитую корневую систему с корнями I порядка общей длиной до 170,5 см, многочисленными корнями II и III порядка. Надземный прирост составил 4 см.

S. japonica ´Gold flame´ – куст до 0,8 м высотой, компактный. Листья меняют свою окраску в те-

© Хархота Л.В.

чение вегетационного периода: от бронзово-оранжевого весной при распускании до нежного зеленовато-желтого летом и медно-оранжевого, малинового цвета осенью. Цветет в июле-августе пурпурно-розовыми цветками. Полуодревесневшие черенки даже в контрольном варианте имели высокий ризогенез (укореняемость составила 91%, общая длина корней I порядка – 23,7 см, прирост надземных побегов – 0,7 см). Но черенки, обработанные стимуляторами роста (лучшие показатели регенерации у черенков после обработки их спиртовыми растворами ИУК и ИМК), имели более разветвленную корневую систему и надземный прирост побегов до 10 см.

S. japonica ´Golden Princess´ – низкорослый кустарник высотой до 0,6 м. Крона приплюснутой, стелющейся формы. Побеги густо укрыты золотисто-желтыми листьями. Цветет в июне-июле бледно-розовыми цветками. Декоративен в течение всего вегетационного периода. Высокую укореняемость было отмечено у одревесневших черенков, обработанных спиртовыми растворами ИМК и ИУК – 40 и 45%, соответственно. Черенки имели хорошо развитую корневую систему с корнями I – III порядка, надземный прирост до 1 см. У полуодревесневших черенков отмечено активное корнеобразование даже в контрольном варианте (укореняемость составила 80%), использование стимуляторов роста способствовало повышению регенерации черенков: укореняемость составила 90 – 95%. Во время высаживания черенков в контейнеры для доращивания они имели надземный прирост побегов до 5 см.

S. japonica ´Macrophylla´ – красивый кустарник до 1 м высотой с крупными, до 15 см длиной, листьями, красновато-коричневыми при распускании, позже – зелеными, а осенью – эффектными, разнообразной окраски. Цветет в июне-июле розовыми цветками. Очень эффектен. Наблюдали высокую регенерацию одревесневших и полуодревесневших черенков даже без обработки стимуляторами роста. Укореняемость одревесневших черенков в контроле составила 55%, общая длина корней I – III порядка – 91,5 см, надземный прирост – 2,7 см. Максимальную укореняемость черенков наблюдали при использовании спиртового раствора ИУК – 80%, черенки имели надземный прирост до 3,5 см, общую длину корней I – III порядка – 124,2 см. Полуодревесневшие черенки во всех вариантах имели высокую укореняемость – от 80% и более. Лучшие показатели были отмечены при использовании спиртового раствора ИУК (укореняемость – 95%, общая длина корней I – III порядка – 173,7 см, надземный прирост побегов до 23 см).

Укорененные черенки были высажены в I – II декадах июля в контейнеры и помещены на площадку доращивания. К концу вегетационного периода укорененные черенки можно было высаживать на постоянное место произрастания, они имели хорошо развитую корневую систему, значительный прирост надземных побегов.

Выводы.

1. Изученные культивары видов рода *Spiraea* L. являются высокодекоративными растениями в течение всего вегетационного периода, различаясь между собой по размерам куста, размерам и окраске листьев и цветков.
2. Они неприхотливы к почвенным условиям, зимостойки, засухо-, дымо- и газоустойчивы, хорошо переносят условия промышленного региона.
3. Данные культивары видов рода *Spiraea* L. имеют высокую способность к корнеобразованию, их можно успешно размножать стеблевыми черенками. Размножение одревесневшими черенками позволяет уже к концу первого года вегетации получить качественный посадочный материал для использования в озеленении на юго-востоке Украины.

РЕЗЮМЕ

Досліджено регенераційну здатність високодекоративних культиварів видів роду *Spiraea* L. Виявлено особливості ризогенезу різних типів стеблових живців, досліджено вплив стимуляторів росту на процес укорінювання живців та розвиток їх кореневої системи. Встановлено можливості розробки ефективних засобів отримання якісного садивного матеріалу малопоширених високодекоративних культиварів видів роду *Spiraea* L.

SUMMARY

Regenerative ability of the genus *Spiraea* L. species high ornamental cultivars hase been studied. Rhizogenic peculiarities of stem cuttings of different types have been revealed. Growth stimulator effect both on rooting of cuttings process and on their root system development have been studied. Opportunities for development of the effective methods for obtaining of quality growth material of the genus *Spiraea* L. species high ornamental minor cultivars have been revealed.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Поляков О.К. Використання дендрологічних ресурсів Донбасу в системі фітооптимізації техногенного середовища // Укр. ботан. журн. – 1998.– Т. 55, № 4. – С.417-421.
2. Рубцов Л.И. Деревья и кустарники в ландшафтной архитектуре. – Киев: Наукова думка. – 1977. – 271 с.
3. Глухов О.З., Довбиш Н.Ф. Прискорене розмноження малопоширених деревних листяних рослин на південному сході України. – Донецьк: ТОВ «Лебідь», 2003. – 162 с.

Надійшла до редакції 31.10.2007 р.

ЕКОЛОГІЯ ТА ТЕХНОГЕННА БЕЗПЕКА

УДК 504:004.358

ОЦІНКА ЕКОЛОГІЧНИХ РИЗИКІВ ПРИ ЗАБРУДНЕННІ ВОДНИХ ОБ'ЄКТІВ (НА ПРИКЛАДІ РІК ТА ВОДОЙМИЩ ДОНЕЦЬКОЇ ОБЛАСТІ)

Г.В.Звягінцева,
Донецький національний технічний університет

Ідентифікація екологічних небезпек, що пов'язані з забрудненням водних об'єктів

У Донецькій області нараховується 247 рік, з них 8 мають довжину понад 40 км. Головна водна артерія краю -- ріка Сіверський Донець, яка протікає по його території протягом 95 км. Загальна довжина ріки складає 1053 км, площа басейну 100 тис. км^2. Основні ліві притоки Сіверського Дінця – Жербець, Оскол; праві – Казенний Торець, Бахмут, Лугань. Сіверський Донець належить басейнові ріки Дон. З Донецького кряжа беруть початок такі ріки як Самара і Вовча, що належать басейнові ріки Дніпро. Ріки Кальміус із Кальчиком, Міус із Кринкою та інші невеликі річки впадають у Азовське море. Природний стік рік, що формується у межах області, складає 550 - 900 млн. м^3 у рік.

Серед водних об'єктів області варто виділити також 1804 штучних водойм із площею водного дзеркала більш 1 га, з них 8 водоймищ площею більше 6 км^2. На території області є також більш 1650 ставків. Загальний обсяг водойм складає 1100 млн. м^3. Основні водоймища – Кураховське, Углегорське, Павлоградське, Старобешевське, Клебан-Бикське, Карловське, Краснооскольске та ін.

Систематичний моніторинг поверхневих вод на території області здійснює Сіверсько-Донецьке басейнове управління водних ресурсів (БУВР) та Донецький обласний центр з гідрометеорології (гідрометеоцентр). БУВР контролює якість води на 70 створах 22 річок, 4 водосховищ та Азовському морі, у свою чергу, гідрометеоцентр контролює забруднення поверхневих вод на 18 створах 11 річок та Азовському морі.

До переліку показників хімічного складу та фізичних властивостей води, які контролюються суб'єктами моніторингу, належать наступні: температура, колір, прозорість, запах, pH, жорсткість, розчинений кисень, зважені речовини, мінералізація, хлориди, сульфати, іони амонію, нітрити, нітрати, фосфати, гідрокарбонати, ХСК, БСК$_5$, БСК$_{20}$, нафтопродукти, легкі феноли, залізо, марганець, нікель, кобальт, цинк, свинець, ціаніди, роданіди, кальцій, магній, натрій, мідь, хром$^{6+}$, СПАР, діоксид вуглецю, сірководень, пестициди, кремній, фосфор загальний, колі-індекс та інше.

Деякі результати експериментального дослідження якості води, що виконані суб'єктами екологічного моніторингу у період з 1993 по 2005 роки, наведено у таблицях 1 і 2.

Таблиця 1. Характеристика забруднення рік Кальміус та Кальчик за період з 1993 по 2005 роки найбільш розповсюдженими забруднювачами

Роки / Забруднювач	Ретроспективні дані за середньорічними концентраціями у водних об'єктах, мг/л												
	1993	1994	1995	1996	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003	2004	2005
КАЛЬМІУС													
нижче міста Донецьк (код створу 1300047)													
Сульфати	642,6	523,8	564,75	570,05	647,71	673,55	585,09	560,57	564,38	560,44	581,00	601,50	584,30
Хлориди	266,6	267,9	218,95	227,61	287,93	277,83	218,83	230,49	219,33	227,27	205,30	203,25	205,90
Зважені речовини	46	18,5	18,25	21,94	17,18	14,18	12,00	14,07	14,62	12,78	12,33	13,67	13,08
до м. Маріуполь (код створу 1300048)													
Сульфати	907,74	942,98	926,7	904,67	945,17	947,35	954,50	975,50	963,00	935,25	968,36	979,00	985,00
Хлориди	521,43	570,00	563,33	570,83	556,67	508,06	599,10	556,82	577,75	549,93	557,84	588,95	547,43
Сухий залишок	1396,1	1397,9	1380,7	1276,7	1263,3	1325,1	1580,3	1021,8	1331,5	1179,0	1203,5	1050,6	1075,3
ріка Кальміус, устя (код створу 1300049)													
Сульфати	902,44	1064,85	1050,18	1106,73	1006,42	1147,09	1157,29	1060,17	1608,60	1449,25	1117,36	1244,42	1062,17
Хлориди	891,11	1404,55	1291,67	1318,18	1128,33	1252,84	1748,50	1437,68	1343,66	1145,05	1574,31	1991,38	1796,89
Сухий залишок	4836,11	5359,09	5069,50	5076,27	5770,33	5167,77	5809,71	5411,50	5729,60	5284,75	5442,09	5670,75	6031,92
Зважені речовини	10,40	11,66	10,49	14,10	11,50	11,65	11,21	13,00	11,70	10,38	12,32	12,75	14,75
КАЛЬЧИК													
гирло (код створу 1300052)													
Сульфати	1112,26	1151,91	1126,28	1115,50	1148,45	1046,20	1364,67	1162,33	1138,00	1151,50	1165,09	1062,17	1098,92
Хлориди	532,50	1449,09	1375,00	1334,58	1309,09	1351,40	1357,43	1313,83	1361,00	1364,53	1331,01	1299,85	1355,69
Сухий залишок	3010,00	2843,00	2897,00	2752,67	2804,00	2892,75	2112,67	2523,83	2437,20	2490,50	2468,09	2265,08	2185,05
Зважені речовини	7,96	11,73	11,31	11,58	11,23	10,00	11,33	12,00	11,70	11,25	12,23	11,58	13,38

© Звягінцева Г.В.

Таблиця 2. Характеристика забруднення рік Сіверський Донець, Кривий та Казений торець і Бахмут за період з 1993 по 2005 роки найбільш розповсюдженими забруднювачами

Роки / Забруднювач	Ретроспективні дані за середньорічними концентраціями у водних об'єктах, мг/л												
	1993	1994	1995	1996	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003	2004	2005
СІВЕРСЬКИЙ ДОНЕЦЬ													
с. Райгородок (код створу 1300011)													
Сульфати	240,15	258,14	296,56	314,13	261,57	268,97	225,73	254,27	221,39	235,58	242,19	303,22	296,63
Нітрити	0,25	0,27	0,27	0,19	0,24	0,11	0,08	0,07	0,07	0,07	0,08	0,06	0,08
Зважені речовини	16,13	14,21	17,84	17,46	11,78	9,35	8,56	7,24	12,06	8,42	10,62	6,90	7,77
с. Райстародубівка (код створу 1300012)													
Сульфати	95,19	32,63	75,55	46,68	45,61	34,84	26,32	35,83	29,95	25,95	11,95	69,17	43,42
Зважені речовини	3,42	6,46	9,30	0,83	3,11	2,74	1,83	1,38	4,39	2,34	0,58	3,42	9,21
Нітрити	0,52	0,56	0,50	0,59	0,47	0,21	0,15	0,16	0,13	0,16	0,14	0,10	0,12
нижче р. Бахмут, с. Дронівка (код створу 1300014)													
Сульфати	441,88	321,96	341,76	369,63	380,66	303,47	313,10	387,42	377,10	398,28	349,54	320,78	384,22
Зважені речовини	20,50	13,17	9,00	9,90	10,70	5,00	3,50	1,25	9,88	7,88	8,12	2,50	9,20
Нітрити	0,60	0,42	0,69	0,39	0,40	0,23	0,15	0,16	0,13	0,13	0,10	0,10	0,11
КРИВИЙ ТОРЕЦЬ													
гирло, Карлівська гребля (код створу 1300034)													
Сульфати	672,43	595,47	619,44	559,96	582,03	589,40	593,83	551,40	600,65	757,10	735,14	744,47	762,92
Зважені речовини	28,18	24,32	19,17	18,06	10,61	15,75	12,37	12,89	11,16	11,60	9,21	14,14	6,27
Нітрити	1,16	,37	,46	,18	,22	0,60	0,48	0,54	0,34	0,45	0,43	0,32	0,38
КАЗЕННИЙ ТОРЕЦ													
нижче впадання ріки Кривий Торець (код створу 1300035)													
Сульфати	802,15	594,85	558,38	537,36	581,30	559,28	588,01	537,96	516,67	777,83	740,41	757,24	781,53
Нітрити	0,89	,32	,48	,09	,14	0,63	0,47	0,44	0,34	0,45	0,40	0,30	0,35
Зважені речовини	21,88	10,58	18,69	18,63	7,11	12,75	8,92	9,42	10,18	12,69	8,82	15,37	6,3
гирло, с. Райгородок (код створу 1300038)													
Сульфати	582,91	520,02	566,64	579,06	517,99	594,64	606,36	525,15	577,05	526,49	580,84	552,79	581,25
Хлориди	397,57	311,46	332,33	370,41	331,08	367,28	382,54	371,57	328,05	375,22	406,77	414,42	450,69
Нітрити	0,81	,12	0,99	,10	0,96	0,52	0,38	0,46	0,33	0,40	0,31	0,26	0,33
Зважені речовини	8,31	11,16	17,44	10,12	5,34	9,74	10,30	8,69	10,36	7,67	7,51	3,22	3,89
БАХМУТ													
ирло, с. Дронівка (код створу 1300040)													
Сульфати	516,55	592,33	573,23	529,1	593,03	599,53	607,24	518,15	540,43	534,38	593,20	554,84	574,17
Хлориди	470,38	351,90	327,78	382,23	360,33	410,03	410,16	366,83	363,25	337,65	441,60	408,98	400,73
Нітрити	0,68	0,70	0,81	0,43	0,46	0,28	0,21	0,32	0,30	0,22	0,19	0,23	0,24
Зважені речовини	13,03	13,67	11,63	14,38	14,10	10,17	7,7	7,67	10,38	7,00	9,75	4,88	6,07

Оцінка якості води рік з 1993 по 2005 роки проводилась за 50 показниками, у таблицях 1, 2 наведено тільки дані щодо основних показників, за якими спостерігалося стабільне перевищення рівня забруднення діючих норм. При дослідженні даних, які були зібрані по 70 створах 22 рік Донецької області, 4 водосховищам та 1 озеру, для більш детального аналізу обрана інформація щодо найбільш забруднених ділянок водотоків.

Останні роки у воді практично усіх рік області спостерігається підвищений вміст солей. Однієї з основних причин цього є скидання мінералізованих шахтних вод, з якими у водні об'єкти за рік надходить понад 1 млн. тонн солей. Як показує аналіз показників якості води водних об'єктів Донецької області, у багатьох ріках перевищення діючих нормативів спостерігалося за біохімічним споживанням кисню, сульфатами та іонами амонію. Це вказує на підвищений вміст легкоокислюваних органічних речовин у річковій воді та значній частці скидань речовин, що містять в собі сульфат-іони. У ріках Приазов'я за останні 10 років зафіксовано постійне збагачення вод мінеральними формами азоту. Що стосується важких металів, то їхня концентрація, також як і нафтопродуктів, має тенденцію до зменшення з початку 1990 року. Сольове забруднення поверхневих вод регіону, у першу чергу, пов'язано зі скиданням у річкову мережу шахтних та промислових вод, а також сільськогосподарською діяльністю людини.

Несприятливий екологічний стан водних об'єктів області обумовлено природними умовами та високим техногенним тиском на навколишнє середовище. Слід зазначити, що проблема якості води у ріках

Донбасу існує більш 50 років. Найбільш забрудненими ріками, як свідчать дані суб'єктів екологічного моніторингу, є ріки Кальміус, Бахмут та Кальчик. У цілому серед основних річкових басейнів області найгіршим станом якості відрізняються води рік Приазов'я та Дніпра, у зв'язку з їхнім високим забрудненням компонентами сольового складу і біогенних речовин. Нині рівень забруднення поверхневих вод у регіоні вище фонового рівня 1994 – 1995 років, але нижче фонового рівня 1985 – 1988 років.

Забруднення рік з роками істотно змінюється і залежить від середньорічного стоку та інтенсивності промислової діяльності. Практично на усіх створах спостережень зафіксовано ситуації та випадки, коли екологічний стан водних об'єктів протягом року погіршується до рівня дуже забруднених і дуже поганих вод. Різниця між максимальними і середніми значеннями забруднення вод досить велика. Наявність таких небезпечних ситуацій у окремі періоди та сезони різко погіршує стан гідроекосистем.

Ідентифікація екологічних небезпек при забрудненні водних об'єктів регіону передбачає встановлення для кожної з потенційних небезпек, що ініціюється у водному середовищі, спроможності факторів небезпеки викликати несприятливі ефекти або наслідки у об'єктів живої природи. Ідентифікація небезпек є початковим етапом процедури оцінки ризику.

При ідентифікації екологічних небезпек вирішуються наступні завдання:

- виділення водних об'єктів, для яких необхідно виконати аналіз небезпек й оцінку ризиків;
- збір та аналіз даних про джерела, склад і умови забруднення води на виділених об'єктах, виявлення шкідливих і небезпечних факторів (речовин), встановлення небезпечних випадків забруднення середовища;
- установлення реципієнтів та виділення уразливих об'єктів впливу;
- визначення видів впливу, вивчення несприятливих ефектів, які можуть виникнути у об'єктів впливу, вибір кількісних параметрів та показників для наступної оцінки ризиків;
- характеристика небезпеки шкідливих речовин, кількісна оцінка ступеня небезпеки та порівняння значень діючих факторів з безпечними рівнями для кожного виділеного об'єкта впливу та виду впливу;
- виявлення пріоритетних факторів впливу, складання переліку шкідливих та небезпечних забруднювачів води на регіональному рівні, а також визначення можливості появи несприятливих ефектів та наслідків у об'єктів живої природи, що викликані дією цих факторів.

Ідентифікація небезпек виконується при наявності шкідливих та небезпечних речовин у навколишньому середовищі, при цьому необхідно керуватися переліками поширених і небезпечних забруднюючих речовин. Зазначені переліки укладено для різних біогеохімічних середовищ та затверджено відповідними нормативними документами України, а саме: при забрудненні природних вод – це перелік забруднюючих речовин, затверджений Постановою КМ України від 11.09.96 № 1100. При ідентифікації небезпек слід першочергово орієнтуватися на хімічні речовини, які сьогодні підлягають аналітичному контролю у навколишньому природному середовищі суб'єктами екологічного моніторингу в Україні.

За результатами ідентифікації небезпеки формується перелік (зазвичай до 10 – 15) пріоритетних речовин, що найкращим чином відображують реальний ризик впливів.

Головними критеріями для вибору пріоритетних забруднюючих речовин мають бути їхні токсичні властивості, розповсюдженість у водних об'єктах та спроможність їхніх негативних впливів на об'єкти живої природи.

В Україні відповідно до [1, 2] усі водні об'єкти поділяють на два типи: рибогосподарського водокористування та господарсько-побутового водокористування. До рибогосподарських водних об'єктів згідно з [1] відносяться Чорне море з лиманами, протоками та затоками; Азовське море з лиманами, затоками, басейн р. Дніпро з лиманами, водосховищами; басейн р. Дністер з лиманами, водосховищами; басейн р. Сіверський Донець з водосховищами; басейн р. Південний Буг з водосховищами та лиманами; басейн р. Західний Буг з водосховищами; басейн р. Дунай; водойми – охолоджувачі енергетичних об'єктів і технічні водойми; озера. Усі інші водні об'єкти (а саме, ріки Приазов'я) відносяться до господарсько-побутового водокористування. Зараз в залежності від того, до якої категорії належить об'єкт водокористування, для оцінки якості води використовують різні безпечні рівні впливу: гранично допустимі концентрації для водних об'єктів рибогосподарського водокористування або гранично допустимі концентрації для водних об'єктів господарсько-побутового водокористування.

При ідентифікації небезпек щодо забруднення водних об'єктів Донецької області установлено, що найбільш небезпечними речовинами та іонами є сульфати, хлориди, нітрити, а також зважені речовини та сухий залишок. При впливах зазначених небезпечних факторів найбільш вразливим об'єктом впливу є риби та водні організми.

У загальному випадку головними об'єктами (реципієнтами) для оцінки ризику при забрудненні природних вод можуть бути людина, риби та водні організми, але останні є найбільш вразливими об'єктами і такими живими істотами, що найбільш підпадають під вплив. При оцінці ризиків в якості видів впливу шкідливих речовин, які знаходяться у воді, слід розглядати хронічний вплив на риб та водні організми. Нині для цих істот встановлено гранично допустимі концентрації (дивись табл. 3).

Таблиця 3. Безпечні рівні та показники небезпеки шкідливих речовин та іонів при негативних впливах внаслідок забруднення поверхневих вод

№ з/п	Назва забруднюючої речовини або іону (хімічна формула)	Рибогосподарського водокористування		Господарсько-побутового водокористування		
		Гранично-допустима концентрація, мг/л	Лімітуючий показник шкідливості	Гранично-допустима концентрація, мг/л	Лімітуюча ознака шкідливості	Клас небезпеки
1	Аміак (NH_3)	0,05	токс.	2,0	с.-т.	3
2	Зважені речовини	0,75		0,25[x] мг/дм^3 0,75[xx] мг/дм^3		
3	Залізо (Fe)	0,05[*)]	токс.	0,3[**]	орг.	3
4	Кадмій (Cd)	0,01[*)]	токс.	0,001	с.-т.	2
5	Кобальт (Co)	0,005[*)]	токс.	0,1[**]	с.-т.	2
6	Мідь (Cu)	+0,001[*]	токс.	1,0[**]	орг.	
7	Молібден (Mo)	+0,0012[*]	токс.	0,25	с.-т.	2
8	Миш'як (As)	0,05	токс.	0,05[**]	с.-т.	2
9	Нікель (Ni)	0,01	токс.	0,1[**]	с.-т.	3
10	Нітрати (NO_3^{2-})	40	с.-т.	45	с.-т.	3
11	Нітрити (NO_2^{2-})	0,08	Токс.	3,3	с.-т.	2
12	Ртуть (Hg)	0,0001[*)]	токс.	0,0005	с.-т.	1
13	Свинець (Pb)	0,01[*)]	токс.	0,03	с.-т.	2
14	Сірковуглець (CS_2)	1,0	токс.	1	орг.	4
15	Сульфати (SO_4^{2-})	100,0	с.-т.	500	орг.	4
16	Сухий залишок			1000 мг/дм^3		
17	Фосфати (PO_4^{3-})	3,2		3,5	орг.	3
18	Хлориди (Cl^-)	300	с.-т.	350,0	орг.	4
19	Хром IV (Cr^{6+})	0,001	с.-т.	0,05	с.-т.	3
20	Ціаніди ($(CN)^-$)	0,05	токс.	0,1[***]	с.-т.	2

Лімітуючий показник шкідливості, відповідно до якого установлено гранично-допустима концентрація (*ГДК*):
с.-т. – санітарно-токсикологічний; заг. – загальносанітарний; орг. – органолептичний; токс. – токсикологічний.
[x] – для господарсько-питного водокористування, а також для водопостачання харчових підприємств;
[xx] – для купання, спорту та відпочинку населення, а також водоймища у межах населених міст;
[*)] – ГДК установлено для морських водоймищ; [*] – до природного фонового вмісту;
[**] – для неорганічних сполук, з урахуванням валового вмісту усіх форм;
[***] – ціаніди прості та комплексні (за винятком ціанферратів у розрахунку на ціан-іон).

Таким чином, оцінку екологічних ризиків при забрудненні водних об'єктів слід проводити шляхом вивчення хронічної дії шкідливих речовин на риб та водні організми. Такий вплив на ці живі організми передбачає, що можуть бути відхилення біологічних показників і характеристик стану організму від норми або рівня фону; захворюваність внутрішніх органів; сховані і хронічні ушкодження, зниження стійкості. Оцінка впливу у цьому випадку проводиться порівнянням рівня забруднення середовища з гранично допустимою концентрацією речовини у воді водних об'єктів рибогосподарського водокористування.

Кількісна оцінка ризиків техногенних впливів за комплексом критеріїв у роботі проводилась на підґрунті даних екологічного моніторингу щодо найбільш забруднених рік Донецької області, а саме для рік Кальміус, Кальчик, Бухмут, Кривий та Казений Торець, а також для деяких створів Сіверського Донця.

Кількісна оцінка екологічних ризиків

Оцінка екологічних ризиків це отримання і узагальнення якісної та кількісної інформації про рівні впливу шкідливих та небезпечних факторів на реципієнтів та визначення ймовірності несприятливих ефектів та наслідків. Оцінка ризику є основним елементом аналізу ризику.

Метою оцінки ризиків є виявлення небезпек, отримання і узагальнення якісної та кількісної інформації про рівні та наслідки дій шкідливих та небезпечних факторів на уразливі об'єкти впливу та визначення ймовірності наслідків для попередження розвитку несприятливих ефектів і для обґрунтування управлінських рішень щодо зменшення рівня ризику.

Розробка методики кількісної оцінки ризиків, пов'язаних з забрудненням водних об'єктів, грунтувалася на принципах, які полягають у наступному.

1. При кількісному визначенні ризику та при аналізі різних видів впливу використовуються основні закономірності, які визнані у теорії небезпеки та ризику, тобто безпечні рівні впливу, індексний підхід при оцінці небезпеки, адитивність показників небезпеки та ризиків, пороговий принцип, залежність «вплив-ефект» тощо.

2. У якості об'єктів впливу розглядаються організми, які живуть у вивчаємому середовищі. Головними об'єктами для оцінки ризику при забрудненні водних об'єктів є риби та водні організми. У даному випадку вони є найбільш уразливими реципієнтами. Зараз для цих організмів основним видом негативного впливу, якій може вивчатися при оцінці ризиків, є хронічний вплив небезпечних речовин.
3. Базовим визначенням у теорії небезпеки та ризику є залежність «вплив-ефект» («доза-ефект»), яка відображає характеристику впливу і визначає зв'язок між впливаючим фактором (наприклад, дозою або концентрацією забруднюючої речовини) та випадками (ймовірностями) несприятливих ефектів і наслідків у об'єктів негативного впливу (наприклад, загибель, гостре отруєння, хронічна захворюваність, радіаційне ураження тощо). Основою для формування залежності «доза-ефект» є кількісна інформація про впливи фактора небезпеки та його наслідки для живого об'єкта. Залежність «вплив-ефект» кількісно сугубо конкретна, охоплює області впливів від безпечних рівнів (від украй низьких концентрацій) до верхніх меж максимально недіючих концентрацій (або порогів дії шкідливих речовин), при яких можуть бути негативні ефекти у вразливих груп об'єктів впливу.
4. Для оцінки індивідуального ризику впливів хімічних речовин при забрудненні водних об'єктів у якості кількісної міри ризику приймається ймовірність реалізації потенційних небезпек:

$$R = \sum_{k=1}^{n} W_k(HQ), \qquad (1)$$

де $W_k(HQ)$ – залежність «доза-ефект», умовна ймовірність нанесення шкоди об'єкту впливу при поглинанні концентрації (дози) величиною C k-го шкідливого інгредієнта; $HQ = C/I$ – коефіцієнт небезпеки; I – безпечний рівень; n – кількість можливих небезпечних інгредієнтів у водному середовищі, що вивчається.

5. При кількісній оцінці ймовірності розвитку несприятливих ефектів у об'єктів впливу використовують критерій додаткового (атрибутивного) ризику.
Атрибутивний (додатковий) ризик визначає долю ризику, який обумовлений впливом шкідливого фактора навколишнього середовища та уявляє собою ймовірність виникнення негативних ефектів, які пов'язані з цим фактором (у % від загальної кількості цих ефектів у об'єктів, які підпадають під вплив забрудненого водного середовища, що вивчається). Залежність «доза-ефект» зв'язує атрибутивний ризик з кількісною характеристикою фактора негативного впливу, наприклад, коефіцієнтом небезпеки.
Характерний вигляд залежності «доза-ефект» ілюструється рисунком 1.

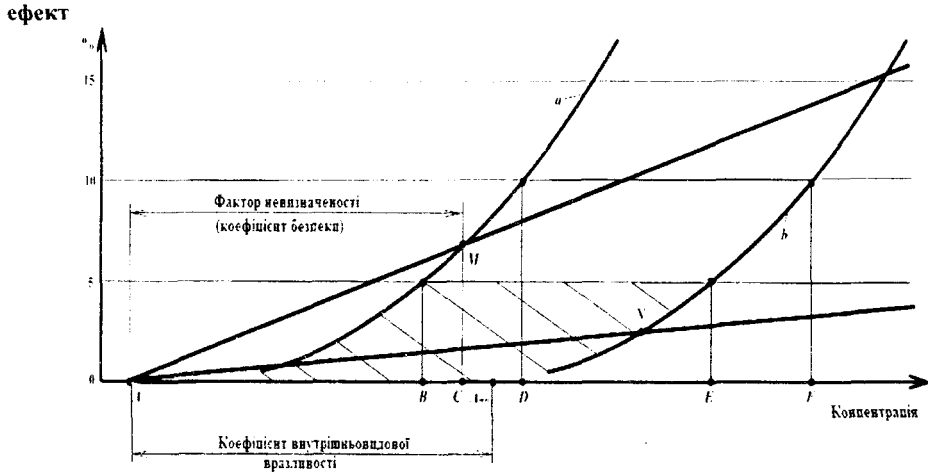


Рис. 1. Характерний вигляд залежності «доза-ефект»

A – безпечний рівень (*ГДК*); *C* – порогова концентрація; *B* – найменша величина порога дії; *F* – найбільша величина порога дії; AA_{max} – діапазон максимально недіючих концентрацій; *M* – опорний рівень ризику для вразливих груп (збільшення частоти шкідливих реакцій на 5 – 10 % у порівнянні з фоном);
□ – область порогового рівня; ▨ – область недіючого рівня;
a – верхній гарантійний інтервал залежності «доза-ефект» для вразливих груп;
b – верхній гарантійний інтервал залежності «доза-ефект» для невразливих груп.

6. При кількісній оцінці ризику зазвичай для опису сильних та слабких впливів використовують різні математичні моделі. Такий підхід дозволяє отримати результати, які наближаються до фактичних даних. Слід зазначити, що частіше за все при слабких впливах використовують лінійні залежності «вплив-ефект», а при сильних – *S*-образні розподіли з наочно представленою невизначеністю, що зумовлено варіабельністю даних.

Оцінку залежності «доза-ефект» при хронічному впливі на риб та водні організми здійснюють шляхом імітаційного моделювання можливої області впливів недіючого рівня (дивись рис. 1).

Безпечний рівень впливу (*ГДК*) приймається як мінімальне значення діапазону недіючих концентрацій, що спостерігається у найбільш вразливих груп. Це випливає з визначення безпечного рівня – вплив на живий об'єкт концентрації протягом усього її життя ймовірно не приведе до виникнення неприпустимого ризику для найбільш вразливих груп.

При хронічних впливах максимальне значення діапазону недіючих концентрацій можливо розглядати як верхню межу недіючих концентрацій. Ця межа уявляє собою максимальну недіючу концентрацію при впливах на невразливі групи.

7. Законодавчо допустимі норми установлюються відповідно до прийнятих методик визначення безпечних рівнів впливів шкідливих речовин. Наприклад, безпечний рівень впливу (*ГДК* або *RfC*) *установлюється як відношення експериментально визначеної величини порогу дії до коефіцієнта запасу* (K_3) або до добутку фактора невизначеності (*UF*) і модифікуючого фактора (*MF*):

$$ГДК = \frac{P_{hr}}{K_3}; \qquad RfC = \frac{NOAEL}{(UF \cdot MF)}. \tag{2}$$

Значення порогів дії шкідливої величини оцінюють з використанням імовірнісного підходу шляхом встановлення реперних (опорних) доз. Вибір порога впливу базується на обчисленні 95 % – верхнього гарантійного інтервалу для опорного рівня ризику, що характеризує ступінь розходжень між ефектами в досліджувальній та контрольній групах.

Максимальне значення фактора невизначеності *UF* при внутрішньовидовій екстраполяції для риб та водних організмів можна приймати рівним значенню 8,0, мінімальне значення – 1,0. Величину *MF*, яка визначає вірогідність даних, приймають у діапазоні 1,0 ÷ 10,0, найчастіше *MF*=1,0.

8. Діапазони зміни ризику при хронічних впливах в області недіючих концентрацій можна задати з припущення, що на безпечному рівні впливу ризик не перевищує прийнятний рівень ризику (10^{-6}), а на рівні максимально недіючої концентрації для невразливих груп ризик може бути оцінений, виходячи з 5 – 10 % збільшення ризику виникнення несприятливих ефектів у вразливих групах у порівнянні з ризиком природного фону.

9. При оцінці ризику хронічних впливів використовується середньорічне значення концентрації (*C*) шкідливого або небезпечного фактора. Оцінка ризику виконується відповідно до визначення коефіцієнта небезпеки (*HQ*). Верхня межа можливого ризику визначається як лінійно-квадратична інтерполяція кривої, що проходить через дві точки на рисунку 1: А ($HQ = 1$, $R = R_p$) та М (HQ_n , R_n), де R_p – ризик, що дорівнює 10^{-6}, R_n – верхня межа опорного рівня ризику, що дорівнює 0,1 при хронічній дії; R_{nn} – нижня межа опорного рівня ризику, що дорівнює 0,05 при хронічній дії; $HQ = C / ГДК$; $HQ_n = UF$.

Коефіцієнти залежності щодо верхньої межі визначаються відповідно до рівняння (3):

$$R_+ = a \cdot HQ + b \cdot HQ^2, \tag{3}$$

де

$$a = R_p - \frac{\frac{R_n}{HQ_n} - R_p}{HQ_n - 1}; \qquad b = \frac{\frac{R_n}{HQ_n} - R_p}{HQ_n - 1}. \tag{4}$$

Нижня межа можливого ризику визначається як нелінійна екстраполяція розподілу Вейбула:

$$R_- = 1 - e^{-\alpha \cdot (HQ-1)^2}, \tag{5}$$

$$\alpha = \frac{1}{(HQ_n - 1)^2} \cdot ln \frac{1}{1 - R_{nn}}.$$

Середнє значення ризику визначається шляхом імітаційного моделювання ризику у межах мінімального та максимального значень з використанням рівномірного розподілу генераторів випадкових чисел.

Сумарний індивідуальний ризик при впливі шкідливих речовин визначається шляхом складання часткових середніх ризиків для кожної речовини відповідно до рівняння (1).

Імітаційна модель оцінки екологічних ризиків

На основі запропонованої методики кількісної оцінки ризику у середовищі Simulink побудовано імітаційні моделі, що надалі використовувалися для проведення обчислювальних експериментів. Основна підпрограма для визначення значень ризику наведена на рисунку 2.

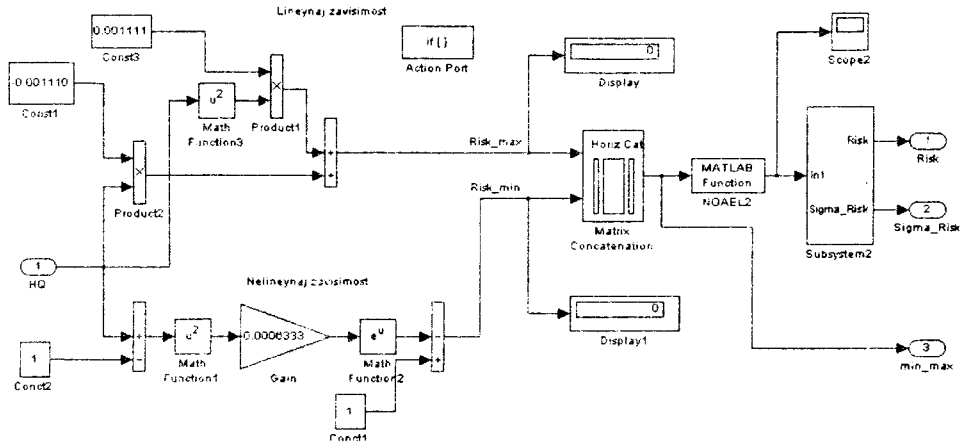


Рис. 2. Блок-діаграма підпрограми імітаційного моделювання ризику, яка виконана інструментами *Simulink* у середовищі *Matlab*

Підпрограма оцінки ризику реалізує кількісний розрахунок параметрів залежності «доза-ефект» відповідно до приведеної вище методики.

У цій об'єктній моделі при визначенні параметрів верхній та нижній рівні ризику визначаються відповідно до рівнянь (3), (5), ризик при даному значенні індексу небезпеки генерується рівномірно розподіленим генератором з використанням блоків *Matlab Function*. Розрахунки ведуться окремо для області прийнятних, малих та великих ризиків з використанням блоку *Subsystem IF*. Результати моделювання виводяться на віртуальні осцилографи *Scope*.

Обчислювальні експерименти

Результати кількісної оцінки екологічних ризиків при забрудненні окремих річок представлено на рисунках 3 – 5. На рисунках наведена характеристика зміни екологічних ризиків для наступних шкідливих іонів: сульфатів, нітритів та хлоридів. Інші шкідливі речовини та іони при концентраціях, які спостерігаються, не надають шкідливого впливу. Окремо слід сказати про забруднення водних об'єктів зваженими речовинами, для яких ризик хронічного впливу дуже високий. Однак, відповідні ГДК для гострих впливів при забрудненні водних об'єктів не встановлюються. При техногенному забрудненні водних об'єктів бувають ситуації, що пов'язані з високим забрудненням води, при яких впливи слід розглядати як гострі. Однак, нині методична база для такої оцінки відсутня.

Як бачимо з приведених рисунків 3-5, за останні тринадцять років ризик хронічної дії при забрудненні малих рік сульфатами зріс у 1,52 рази, а нітратами знизився. У свою чергу ризик, пов'язаний з забрудненням рік хлоридами, досяг рівня, що спостерігався у 1993 – 1994 роках.

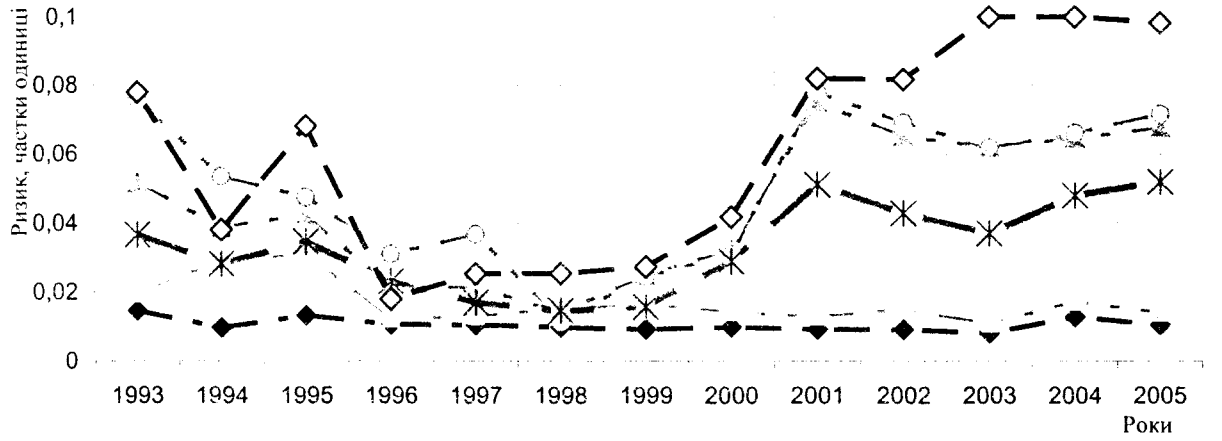


Рис. 3. Динаміка ризику впливів на риб та водні організми при забрудненні сульфатами рік Донецької області:

– Сіверський Донець (1300014); – Сіверський Донець (1300012); – Кривий торець (1300034);
– Казенний торець (1300038); – Казенний торець (1300035); – Бахмут (1300040).

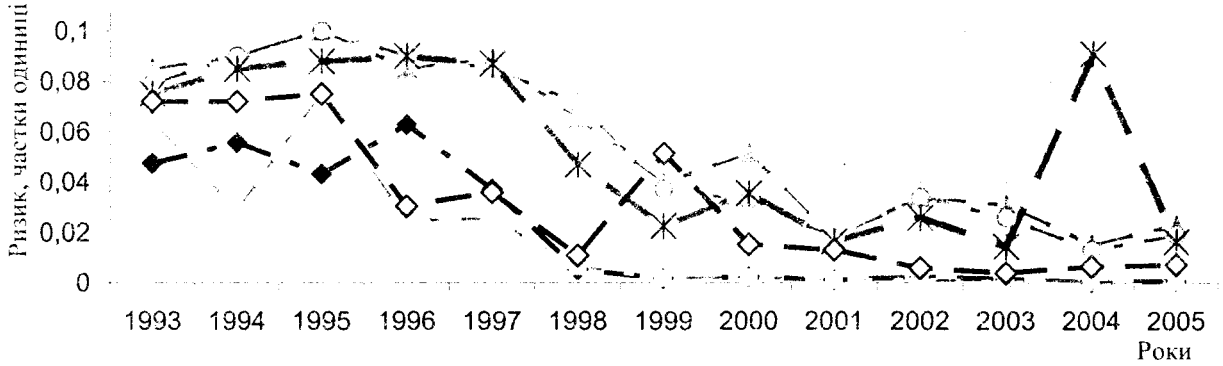


Рис. 4. Динаміка ризику впливів на риб та водні організми при забрудненні нітратами рік Донецької області:
– Сіверський Донець (1300014); – Сіверський Донець (1300012); – Кривий торець (1300034); – Казенний торець (1300038); – Казенний торець (1300035); – Бахмут (1300040).

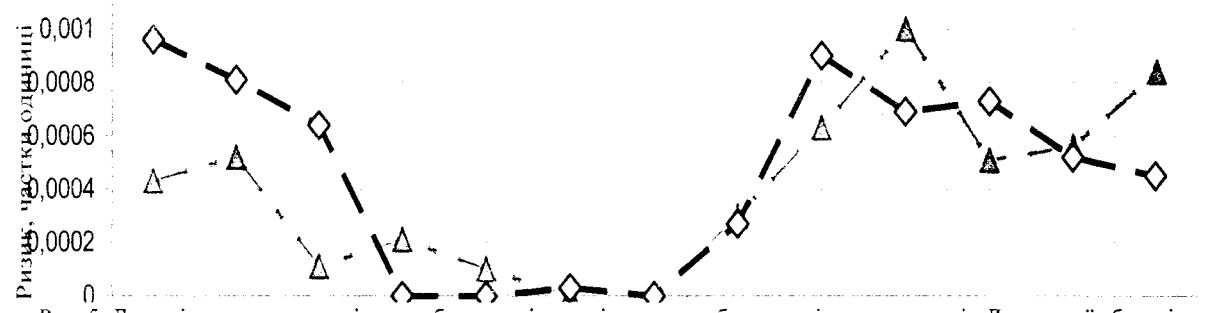


Рис. 5. Динаміка ризику впливів на риб та водні організми при забрудненні хлоридами рік Донецької області:
– Кривий торець (1300038); – Бахмут (1300040).

Висновки

Ріки Донецької області мають високий рівень забруднення сульфатами, нітритами, хлоридами. Достатньо високий рівень забруднення пов'язано також з великим вмістом зважених речовин та сухим залишком. Запропоновано підхід, що дозволяє оцінити екологічні ризики при забрудненні водних об'єктів, при яких рівень небезпеки впливів у забрудненому водному середовищі визначається за ймовірністю виникнення несприятливих ефектів у риб та водних організмів, як найбільш вразливих та таких живих істот, що частіше підпадають під негативний вплив забруднювачів. Виконана оцінка ризику відповідно до запропонованої методики показує, що ризик впливів на риб та водні організми, який пов'язано з забрудненням водних об'єктів, є дуже великими і досягає для сульфатів $(1\div5)\cdot10^{-2}$, для нітритів – $(1\div2)\cdot10^{-2}$ та для хлоридів $(4\div8)\cdot10^{-4}$. Таким чином, навантаження на екологічні системи, пов'язані з забрудненням малих рік Донецької області, є достатньо великим та останні роки (з 1999) має тенденцію до збільшення.

Визначення

RfC – референтна (безпечна) концентрація, мг/м^3; *NOAEL* – рівень впливу, при якому не спостерігається шкідливий ефект; *UF* – фактор невизначеності; HQ – коефіцієнта небезпеки; $K_з$ – коефіцієнт запасу; *MF* – модифікуючий фактор.

РЕЗЮМЕ

Предложен подход, позволяющий оценить экологические риски при загрязнении водных объектов, при котором уровень опасности воздействий определяется по вероятности возникновения неблагоприятных эффектов у рыб и водных организмов, как наиболее чувствительных и подверженных воздействию живых существ. Предложена методика и выполнена количественная оценка экологических рисков для наиболее загрязненных рек Донецкой области.

SUMMARY

An approach allowing to estimate ecological risks at pollution of water objects is offered. A level of dangerous influences in the polluted water environment is estimated on probability of occurrence of adverse effects at fishes and water organisms as the most sensitive objects. A technique of quantitative estimation of ecological risks for rivers of Donetsk area is offered. The quantitative estimation of ecological risks for the most polluted rivers of Donetsk area is executed.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Перелік промислових ділянок рибогосподарських водних об'єктів їх частин. Затв. Постановою КМ України 22.05.96 № 552.
2. Водний кодекс України. 06.06.1995 № 213/95-ВР. Вводиться в дію Постановою ВР N **214/95-ВР** від 06.06.95, ВВР, 1995, N 24.
3. Guidelines for Ecological Risk Assessment/U.S. Environmental Protection Agency. – Washington, DC, 1998. – 114 p. (http://cfpub.epa.gov/ncea/cfm/ recordisplay.cfm?deid=12460).

Надійшла до редакції 20.11.2007 р.

УДК 504.3.054.001.5

АЛГОРИТМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОЛЕЙ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРЫ НАД ПРОМЫШЛЕННЫМ ГОРОДОМ ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ДАННЫМ

Г.В.Аверин, В.А.Павлий,
Донецкий национальный технический университет

Вступление

В настоящее время накоплено большое количество данных, характеризующих загрязнение наземного слоя атмосферы. Сбор экспериментальных данных проводится в течение длительного времени (с конца 70-х – начала 80-х годов) Гидрометеослужбой и Санитарно-эпидемиологической службой Украины, различными организациями Минприроды Украины и другими субъектами экологического мониторинга. В последние годы контроль загрязнения атмосферы осуществляется в 53 городах Украины по 10-15 вредным веществам. При этом количество стационарных контрольных постов различных субъектов мониторинга составляет от 2 до 8 в зависимости от размеров города, объемы накопленных данных включают более миллиона измерений для каждого крупного города. Одновременно с этим, субъектами экологического мониторинга также накапливается информация об основных метеорологических показателях: направлении и скорости ветра, температуре, относительной влажности, атмосферном давлении и др.

В настоящее время Украина вводит новую систему выдачи разрешений на выбросы вредных веществ в атмосферный воздух, что является частью политического курса страны на сближение с законодательством Европейского союза. В этом плане моделирование и прогнозирование уровня загрязнения атмосферы является основой для разработки Программ оздоровления атмосферного воздуха в населенных пунктах, создание которых предусмотрено для городов украинским законодательством. При этом важным фактором прогнозирования уровня загрязнения атмосферы является расчет фоновых концентраций вредных веществ в атмосферном воздухе.

При разработке математических моделей распространения примесей очень часто возникают задачи восстановления по экспериментальным данным полей загрязнения атмосферы. Для решения такого типа задач следует увязать информацию субъектов экологического мониторинга с существующими закономерностями распространения примесей, и в частности, с уравнениями турбулентной диффузии. Общее уравнение распространения примесей имеет вид (1):

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} + u \cdot \frac{\partial c}{\partial x} + \upsilon \cdot \frac{\partial c}{\partial y} + w \cdot \frac{\partial c}{\partial z} = \\ = \frac{\partial}{\partial x}\left(k_{T,x} \cdot \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(k_{T,y} \cdot \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(k_{T,z} \cdot \frac{\partial c}{\partial z} \right) - ac + Q(\tau, x, y, z), \quad (1)$$

где: c – концентрация; τ – время; x, y, z – координаты; u, υ, w – профили скорости ветра по координатам x, y, z; $k_{T,x}$, $k_{T,y}$, $k_{T,z}$ – горизонтальные (вдоль x и y) и вертикальный коэффициенты турбулентной диффузии; a – константа; $Q(\tau, x, y, z)$ – функция эмиссии примеси.

При решении уравнения (1) с определенными краевыми условиями исследователи часто принимают значительное количество допущений, упрощающих исходное уравнение. При постановке задачи атмосферной диффузии согласно (1) часто пренебрегают членом $w \cdot \frac{\partial c}{\partial z}$, горизонтальные коэффициенты турбулентной диффузии принимают постоянными, если уравнение (1) рассматривается в системе координат, не связанной с направлением ветра. Например, основой методического документа [4] является решение уравнения вида (2) как частного случая уравнения (1):

$$u \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y}\left(k_{T,y} \cdot \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(k_{T,z} \cdot \frac{\partial c}{\partial z} \right) + Q \cdot \delta(x, y, z - h), \quad (2)$$

где: $\delta(x, y, z - h)$ – дельта-функция, а координата x совпадает с направлением ветра.

Существуют решения классических задач атмосферной турбулентной диффузии, полученные для областей, достаточно удаленных от неровностей земной поверхности, открытых территорий, вне городской местности при наличии небольшого числа источников загрязнения и т.д. Сравнительный анализ результатов [1-4] показывает, что конечные формы решений упрощенного уравнения (1) для моделей «Гауссовского факела», ОНД-86, Гриффорда-Ханна и др. функционально схожи между собой.

© Аверин Г.В., Павлий В.А.

Имеются также решения (1), реализованные в сложных численных моделях. Например, в основе системы моделирования CALLPUF используется объединенная модель «факела Лагранжа» для прогнозирования распространения примеси от источника, которая основана на использовании распределений Гаусса. Модель была дополнена модулями для описания структуры ландшафта, учета особенностей влажного и сухого распространения примесей и закономерностей простых химических реакций [1]. Модель «факела Лагранжа – Гаусса» решается численно на конечно-разностной сетке, учитывающей множество слоев по вертикальной координате. Однако подобные решения часто не позволяют реализовать для конкретных территорий процедуры адаптации параметров моделей по экспериментальным данным, собранным субъектами мониторинга.

В прикладных задачах атмосферного мониторинга распространены подходы, когда при моделировании распространения примеси в атмосферном воздухе используют модели статистической теории диффузии. В этом случае для расчета концентраций используются решения вида (3):

$$c(x,y,z)=\frac{Q}{2\cdot\pi^{3/2}\cdot\sigma_x\cdot\sigma_y\cdot\sigma_z}e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x{}^2}}\cdot e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y{}^2}}\cdot e^{-\frac{z^2}{2\sigma_z{}^2}}, \tag{3}$$

где: $\sigma_x{}^2,\sigma_y{}^2,\sigma_z{}^2$ – дисперсии распределения примеси в направлении координат x,y,z, определенные экспериментальным путем.

Рассматривая постоянно действующий источник загрязнения высотой h в конкретной точке на плоскости $M(x,y)$ как точечный, и направляя координатную ось x вдоль направления ветра, в работе [2] было получено решение уравнения (2), характеризующее уровень загрязнения атмосферы на уровне земной поверхности вида:

$$c(x,y,z)\big|_{z=0}=\frac{Q}{\lambda_1\sqrt{x^3}}\exp\left(-\frac{u\cdot h^{1+n}}{(1+n)^2\lambda_2\cdot x}-\frac{y^2}{4\cdot\beta\cdot x}\right), \tag{4}$$

где: $\beta,\lambda_1,\lambda_2,n$ – константы.

Зависимость (4) положена в основу методики расчета концентраций вредных веществ при их распространении в атмосфере [4].

Рассмотрим применение уравнения (1) для случая контроля загрязнения атмосферы на стационарных постах. Учитывая, что субъекты мониторинга проводят периодические измерения уровня загрязнения атмосферного воздуха с интервалом 4-12 часов, будем рассматривать в рамках указанных интервалов стационарную задачу переноса примеси $\left(\frac{\partial c}{\partial\tau}=0\right)$. Наблюдение за загрязнением атмосферы в городах проводятся на высоте 2-х метров на контрольных постах, размещенных на открытых площадках. Поэтому в качестве допущения можно считать, что коэффициенты турбулентной диффузии k_T в области средней высоты шероховатости (высоты зданий) постоянны и зависят только от скорости ветра. Это допущение подтверждается видом моделей турбулентности для шероховатых поверхностей [7]. Будем также считать, что в приземном слое (ниже уровня шероховатости поверхности (до 50 м)) концентрация примеси в точке $p(x,y)$ по высоте z приблизительно постоянна вследствие интенсивного турбулентного перемешивания, т.е. $\frac{\partial c}{\partial z}=0$.

Указанные допущения позволяют строить более простые модели, основанные на существенном упрощении уравнения (1). Например, в источнике [5] приводится решение (6) уравнения (5), как частного случая уравнения (1) при действии мгновенного источника мощностью Q:

$$\frac{\partial c}{\partial x}=k_T\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}, \tag{5}$$

$$c(x,y)=\frac{Q}{2\cdot\gamma\sqrt{\pi\cdot k_T\cdot x}}\exp\left(-\frac{y^2}{4k_T x}\right), \tag{6}$$

где: k_T,γ – константы.

Постановка задачи и разработка алгоритмов моделирования полей загрязнения атмосферы

Основной задачей данной работы является разработка алгоритмов моделирования полей загрязнения атмосферы на основе данных, полученных на стационарных контрольных постах загрязнения атмосферы.

Принимая, что источник расположен на поверхности земли $(h = 0)$, из (4) получим похожее на (6) уравнение:

$$c(x, y) = \frac{Q}{\lambda_1 \sqrt{x^3}} \exp\left(-\frac{y^2}{4 \cdot \beta \cdot x} \right), \tag{7}$$

Таким образом, можно считать, что конкретный i-тый постоянно действующий источник, размещенный в точке $g(x_i, y_i)$, осуществляет вклад в формирование поля концентраций на стационарном посту $p(x > x_i, y > y_i)$, при этом концентрация количественно определяется согласно (7). Так как в данном случае источник находится в произвольной точке $g(x_i, y_i)$ с подветренной стороны поста, а соотношение (7) предполагает, что он размещен в начале координат, необходимо скорректировать координаты источника относительно поста путем переноса системы координат источника на величину $(x - x_i)$ и $(y - y_i)$ по осям x, y соответственно.

В промышленном городе имеется значительное множество источников, которые могут вносить свой вклад в формирование поля концентраций вредной примеси. Поэтому для случая контроля загрязнения атмосферы на стационарном посту, используя принцип суперпозиции, можно приближенно представить значение концентрации в точке $p(x, y)$ в виде ряда:

$$c(x, y) = \sum_{i=1}^{N} \frac{A_i}{\sqrt{(x - x_i)^3}} \exp\left(-\frac{(y - y_i)^2}{4 \cdot \beta_i \cdot (x - x_i)} \right), \tag{8}$$

где: A_i, β_i – коэффициенты, характеризующие источники выбросов и параметры турбулентного переноса; N – количество источников; x_i, y_i – координаты источников.

При разработке алгоритмов моделирования загрязнения атмосферы обычно используют указанный подход при расчете концентраций примесей в атмосферном воздухе.

На практике обычно количество источников крайне велико, а их характеристики достоверно не определены, поэтому разложение (8) можно задать в виде:

$$c(x, y) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{A_i}{\sqrt{(x - \varepsilon_x)^3}} \exp\left(-\frac{(y - \varepsilon_y)^2}{4 \cdot \beta \cdot (x - \varepsilon_x)} \right), \tag{9}$$

где: $A_i, \varepsilon_x, \varepsilon_y, \beta$ – константы, причем $0 \le \varepsilon_x \le x, 0 \le \varepsilon_y \le y, 0 \le A_i \le A_{\max}$.

Таким образом, можно считать, что решение уравнения диффузии для концентрации вредной примеси в точке $p(x, y)$ может быть приближенно представлено в виде ряда (9).

В первом приближении раскладывая (9) в ряд по величинам $\frac{\varepsilon_x}{x} < 1$ и $\frac{\varepsilon_y}{y} < 1$, и рассматривая значение концентрации загрязняющего вещества на первом с подветренной стороны контрольном посту как фоновое, получим следующую приближенную формулу:

$$c(x, y) \approx \frac{A_\varepsilon}{\sqrt{x^3}} \exp\left(-\frac{y^2}{4 \cdot \beta_\varepsilon \cdot x} \right) + C_1, \tag{10}$$

где: $A_\varepsilon, \beta_\varepsilon$ – некоторые случайные функции, распределение которых должно определяться по экспериментальным данным; C_1 – значение фоновой концентрации загрязняющего вещества, т.е. в точках, для которых $x \to 0$.

Приближенное решение (10) дает вид функции изменения концентрации примеси в окрестности точки поста наблюдения. Дальнейшая задача заключается в определении неизвестных параметров решения по имеющимся экспериментальным данным. Результаты решения поставленной задачи можно использовать для решения общей задачи восстановления поля концентраций по всему городу в целом.

Алгоритм восстановления поля концентраций над городом предполагает:

- наличие экспериментальных данных, описывающих динамику концентраций загрязняющих веществ на стационарном посту за указанный период:

- наличие географической информации о месте расположения поста (в частности, географических координат);

- использование зависимостей, определяющих изменения концентрации примеси в окрестностях поста наблюдения, например, вида (10);

- формулирование базового алгоритма, позволяющего экстраполировать данные в пределах всего территориально-распределенного объекта.

Географическая информация о месте расположения поста позволяет привязать пост к выбранной декартовой системе координат. Масштаб, размеры и форма области поля концентраций выбираются в зависимости от площади города и требуемой точности расчета. Выбор системы координат должен удовлетворять следующим критериям:

- начальная точка системы координат должна лежать вне объекта, так что значения координат, определенные относительно нее, не должны быть отрицательными;

- ось y для упрощения расчетов должна быть направлена строго на север, ось x – с востока на запад.

После выбора начальной точки определяются координаты всех постов как проекции на соответствующие оси, а также расстояния от постов до начальной точки и расстояния между постами. Для расчета этих параметров лучше всего использовать формулу хаверсинусов [6], которая позволяет более точно определять расстояния в случае относительно близкого расположения постов. В таблице 1 приведены географические и декартовые координаты стационарных постов г. Донецка, измеренные с точностью ±50 м., а на рис. 1 показано расположение постов относительно выбранной начальной точки с координатами (47°53′00.00″ с.ш., 37°37′00.00″ в.д.), при этом размеры области составляют 30х30 км.

Таблица 1. Географические и декартовы (относительно начальной точки) координаты стационарных постов г. Донецка

Номер поста	Северная широта (с.ш.)	Восточная долгота (в.д.)	Относительно начальной точки	
			x, м	y, м
2	48°03′01.28″	37°43′34.73″	8177	18570
4	47°58′28.34″	37°48′02.23″	13720	10140
5	47°58′48.28″	37°51′09.81″	17600	10760
7	48°02′22.23″	37°44′57.36″	9888	17370
9	47°59′36.78″	37°48′49.26″	14690	12260
14	47°57′42.42″	37°44′20.45″	9124	8723

В данной области расположены шесть стационарных контрольных постов загрязнения атмосферы Донецкого Гидрометеоцентра. Накопленные данные представляют собой временные ряды значений концентраций загрязняющих веществ, которые контролировались с 12-ти часовыми интервалами. Измерения проводились по общепринятым методикам согласно нормативному документу [9]. Общий объем экспериментальных данных за указанный период составляет более миллиона наблюдений. Для исследований в работе были использованы временные ряды диоксида азота (NO_2), аммиака (NH_3), диоксида серы (SO_2), оксида углерода (CO), формальдегида (HCHO), фенола (C_6H_6O) и пыли.

Для моделирования изменения концентрации примеси в окрестности контрольного поста в качестве базового уравнения использовалась зависимость (10). Определение видов распределений величин β_ε и A_ε основывалось на оценке этих величин для выбранного направления ветра по всему массиву экспериментальных данных. Для этой цели выбирались наблюдения для близлежащей пары контрольных постов, и составлялась следующая система уравнений (11):

$$\begin{cases} c_i(x_i, y_i) = \dfrac{A_i(\varepsilon)}{\sqrt{x_i^3}} e^{-\frac{y_i^2}{4\cdot\beta_\varepsilon\cdot x_i}} + C_1 \\ c_j(x_j, y_j) = \dfrac{A_i(\varepsilon)}{\sqrt{x_j^3}} e^{-\frac{y_j^2}{4\cdot\beta_\varepsilon\cdot x_j}} + C_1 \end{cases}, \qquad (11)$$

где: i, j – номера двух соседних близлежащих постов, x_i, x_j, y_i, y_j – декартовые координаты постов с номерами i, j.

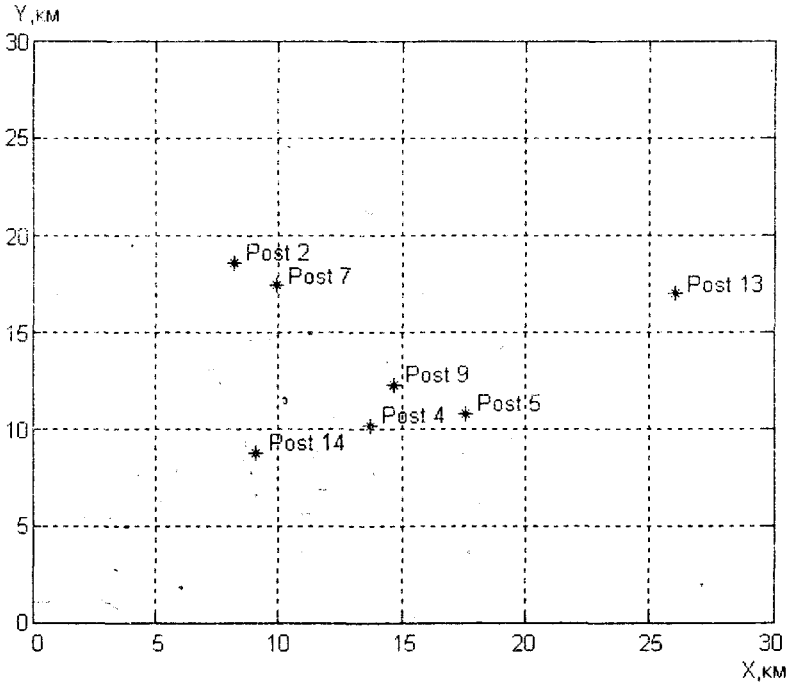


Рис.1. Схема расположения постов относительно начальной точки с координатами (47°53′00.00′′ с.ш., 37°37′00.00′′ в.д.)

Из решения системы (11) определялись численные значения величин β_ε и A_ε.

Следует отметить, что базовое уравнение (2) предполагает моделирование распространения примеси вдоль оси x, которая должна совпадать с направлением ветра, следовательно, и решение системы (11) должно удовлетворять данному требованию. Так как направление ветра динамически изменяется, то в дальнейшем необходимо использовать поворот системы координат. Для этого можно использовать общеизвестные формулы [8], однако заметим, что направление оси x декартовой системы координат отличается от направления на север на угол 90°. Поскольку направление ветра субъектами мониторинга измеряется относительно направления на север, необходимо скорректировать соответствующее значение угла поворота (12):

$$\begin{aligned} x_{u,i} &= x_{g,i}\cos(\alpha - 90) + y_{g,i}\sin(\alpha - 90) \\ y_{u,i} &= y_{g,i}\cos(\alpha - 90) - x_{g,i}\sin(\alpha - 90) \end{aligned}, \qquad (12)$$

где: $x_{u,i}$, $y_{u,i}$ – промежуточные значения координат, полученные после поворота системы координат на угол α; α – угол, характеризующий направление ветра; $x_{g,i}$, $y_{g,i}$ – начальные декартовые координаты контрольных постов (см. табл.1).

Для определения фоновой концентрации C_1 следует определить номер первого контрольного поста с подветренной стороны и переместить начало системы координат в точку, совпадающую с его координатами. Для этого можно использовать следующий алгоритм:

- поиск минимального значения $x_{\min}$ среди элементов множества $x_{u,i}$ и выборка соответствующего ему $y_{\min} = y_{u,i}$;

- смещение координат всех постов на величины $x_{\min}$ и $y_{\min}$ соответственно:

$$x_i = x_{u,i} - x_{\min}; \quad y_i = y_{u,i} - y_{\min}. \qquad (13)$$

Используя решение системы (11) и выражения (13), были получены окончательные формулы для определения коэффициентов β_ε и A_ε.

В данном случае уровень загрязнения на первом с подветренной стороны контрольном посту рассматривается как фоновый, поэтому решение (10) при $x = 0$ должно удовлетворять граничному условию $C = C_1$.

Поскольку для решения (11) необходимо использовать данные наблюдений по двум постам, а количество стационарных постов в крупном промышленном городе обычно больше, то можно определить коэффициенты β_ε и A_ε для всех комбинаций пар близлежащих постов. В этом случае максимальное количество комбинаций составит

$$N = \frac{n^2 - n}{2},$$

где n – количество стационарных постов в городе.

В теоретическом решении коэффициент β_ε устанавливает связь между коэффициентом турбулентной диффузии и скоростью ветра $(k_T = \beta_\varepsilon \cdot u)$, поэтому значение β_ε не может быть отрицательным. Значения β_ε, не удовлетворяющие указанному условию, а также слишком большие значения $(\beta_\varepsilon > 10^5)$ считались аномальными и в дальнейших расчетах исключались.

Для определения значений коэффициентов β_ε и A_ε в связи с необходимостью обработки большого количества данных был разработан программный модуль, позволяющий для заданного количества постов и ингредиентов определить величины β_ε и A_ε согласно решению системы (11) и условий (13). По результатам работы данного модуля были построены графики распределения указанных коэффициентов. Для примера на рис. 2 приводятся виды графиков распределения коэффициентов β_ε и A_ε для диоксида азота (NO_2).

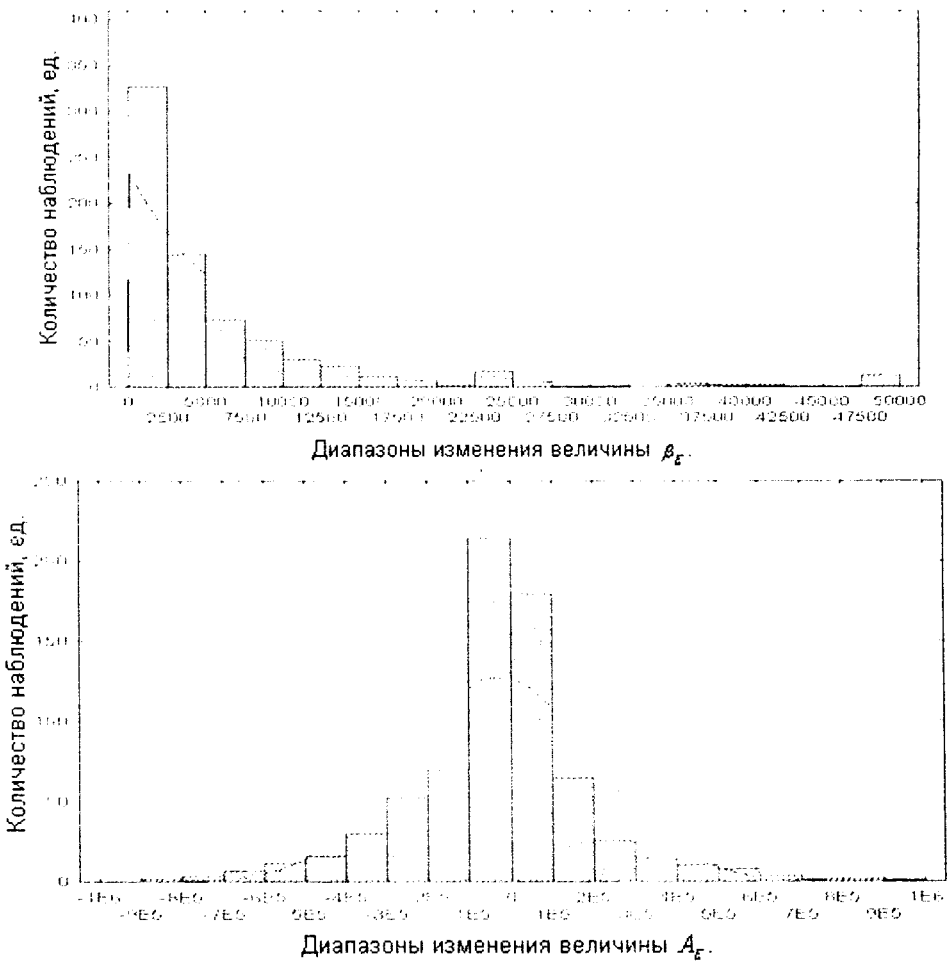


Рис.2. График распределения коэффициентов β_ε и A_ε для диоксида азота (NO_2), построенный по экспериментальным данным для контрольных постов №2 и №7 за период с 2000 по 2006 гг.

Из анализа видов распределений коэффициента β_ε следует, что для всех рассмотренных ингредиентов и контрольных постов распределение носит экспоненциальный характер. Из анализа распределений коэффициентов A_ε видно, что значения коэффициента являются как положительными, так и отрицательными. Так как теоретически коэффициент A_ε характеризует связь с интенсивностью источников выбросов, можно заключить, что на территории исследуемой области в разные периоды времени имеются не только выбросы, но и «стоки» загрязняющих веществ, вызванные процессами оседания, химическими реакциями, атмосферными явлениями и т.д. Вид распределения для большинства ингредиентов в этом случае похож на нормальное распределение.

Так как коэффициент β_ε характеризует параметры турбулентного переноса в конкретной точке и зависит только от вида ингредиента и географического расположения контрольного поста наблюдения, то полученные комбинации значений β_ε можно усреднить для каждого ингредиента и каждого поста в отдельности.

В таблице 2 представлены усредненные значения коэффициента β_ε. Усреднение производилось для всех измерений за 7 лет (с 2000 по 2006 гг.) и для всех комбинаций рассматриваемых пар постов, т.е.:

$$\beta_{\varepsilon_i} = \sum_{\substack{j=1,\\ j\neq i}}^{n} \beta_{\varepsilon_{i,j}} \qquad (14)$$

где: $\beta_{\varepsilon_{i,j}}$ – значение коэффициента, определенное из решения (11), β_{ε_i} – усредненное значение для i-ого поста.

Таблица 2. Усредненные значения коэффициентов β_ε при турбулентном переносе загрязняющих веществ

Ингредиент	Номер поста					
	2	4	5	7	9	14
NO_2	9175,30	5882,09	6250,09	7604,20	6232,50	7316,06
NH_3	15631,82	-	-	11070,26	9492,16	9166,16
Пыль	9884,27	7445,00	7746,19	7602,29	5513,51	5980,65
SO_2	7760,67	6176,70	6474,03	7956,53	6134,90	5432,65
CO	8554,91	3918,36	4860,27	4546,41	6008,50	3467,16
Формальдегид	12797,11	11203,64	12459,13	8260,47	6972,07	-
Фенол	-	-	-	9864,20	6373,95	8193,52

По средним значениям β_{ε_i} в процессе построения моделей определялись значения коэффициентов A_{ε_i} для текущих наблюдений, и эти данные экстраполировались для осуществления пространственного прогноза.

При восстановлении поля загрязнения атмосферы в качестве базового алгоритма можно использовать алгоритмы экстраполяции набора данных на всю площадь территориально-распределенного объекта. Такие алгоритмы позволяют восстановить вид поля распределения некоторой величины для произвольной точки $p(x, y)$, принадлежащей полю, по данным множества точек G, значения величин для которых известны. Используя подобный алгоритм, можно восстановить значения коэффициентов A_ε и β_ε, после чего определить величину концентрации в произвольной точке поля, воспользовавшись уравнением (11).

Следует отметить, что использовать подобные алгоритмы непосредственно для восстановления поля концентраций по данным контрольных постов достаточно сложно, так как изложенный выше подход показывает, что зависимость изменения концентрации от расстояния не является простой функцией и зависит от многих факторов.

Базовый алгоритм восстановления поля для произвольной величины предполагает:

- наличие множества $G\{g_1, g_2, g_3, ..., g_u, ..., g_n\}$ точек, каждая из которых характеризуется своими координатами $g_{u,x}$, $g_{u,y}$ и значением восстанавливаемой величины $g_{u,b}$. Чем больше количество точек, тем точнее будет результат аппроксимации;

- использование функций аппроксимации, определяющих изменение величины в зависимости от расстояния до точки, в которой значение величины известно. Следует отметить, что выбранный вид функции является определяющим при восстановлении поля концентрации. Выбор вида функции базируется на теоретических предположениях о динамике изменения восстанавливаемой величины. Так как коэффициенты A_ε и β_ε для заданного времени и вида ингредиента зависят только от географического по-

ложения точки (с которой связаны шероховатость земной поверхности, интенсивность выбросов и другие факторы), то можно использовать простейшие функции аппроксимации (линейные или обратные);

- использование для всех точек множества одной и той же функции экстраполяции.

Исходя из указанных предположений, предложен следующий алгоритм экстраполяции данных:

- выбирается некоторый шаг h и выполняется построение сетки для этого шага. Каждая точка множества $P\{p_1, p_2, p_3, ..., p_u, ..., p_m\}$, лежащая в узлах сетки, характеризуется своими координатами $p_{u,x}$, $p_{u,y}$ и значением восстанавливаемой величины $p_{u,b}$.

- определяются расстояния между всеми комбинациями пар точек множеств P и G. Обозначив расстояние между точками p_u и g_u как $L(p_u, g_u)$, можно записать следующее соотношение:

$$L(p_u, g_u) = \sqrt{(g_{u,x} - p_{u,x})^2 + (g_{u,x} - p_{u,y})^2}; \quad (15)$$

- для каждой точки $p_u \in P$, $g_{u1 \neq u} \in G$ определяется влияние точки g_u на нее с использованием выбранной функции аппроксимации. Для этого можно использовать зависимость (16):

$$D_{i,b} = \frac{\sum_{u=1}^{n} F(g_{u,b}, L(D_i, g_u))}{\sum_{u=1}^{n} F(1, L(D_i, g_u))}; \quad (16)$$

где: $D = P \cup G, D_i \in D$; $F(\alpha, x)$ – функция аппроксимации, В работе исследовались линейные зависимости вида $F(\alpha, x) = \alpha - \frac{x \cdot \alpha}{M}$ и обратные вида $F(\alpha, x) = \frac{\alpha}{x}$; где: M – максимальное расстояние от точки $p_u \in P$ до границы поля;

- для каждой точки $g_{u1 \neq u} \in D$ определяется сумма соответствующих влияний, вносимых всеми точками $g_u \in G$;

- так как эта сумма согласно условию представляет собой $g_{u,b}$, составляется процентное соотношение, при помощи которого корректируются истинные значения влияний, оказываемых точками $g_u \in G$ на точки $g_{u1 \neq u} \in G$ и точки $p_u \in P$.

- сумма влияний на точки $p_u \in P$ и будет представлять собой искомые значения $p_{u,b}$.

Результаты исследования

Используя указанный алгоритм, был разработан программный модуль, позволяющий моделировать поле произвольной величины для задаваемой функции аппроксимации по множеству точек $g_u \in G$. С помощью данного модуля были восстановлены поля изменения коэффициентов β_ε и A_ε. При этом тестировались различные функции аппроксимации.

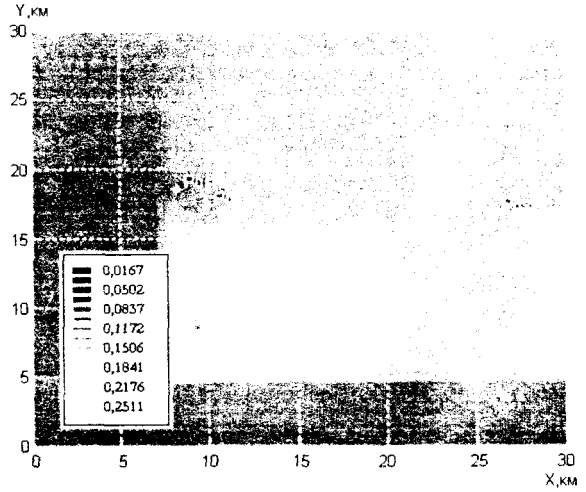


Рис. 3. Вид поля концентрации диоксида азота (NO_2), построенного по экспериментальным данным контрольных постов по состоянию на 17 октября 2006 г (19:00)

Далее, используя (10) и восстановленные значения коэффициентов β_ε и A_ε, было восстановлено поле концентрации C диоксида азота (рис. 3). Следует отметить, что уравнение (10) не может применяться для восстановления значения концентрации в окрестности начальной точки и осей координат, так как при малых значениях координат x, y обладает значительной неопределенностью. Поэтому в качестве левой и нижней границы восстанавливаемой области были выбраны координаты первых постов, встречающихся по направлениям x, y соответственно. Для сравнения в таблице 3 приводятся значения концентраций диоксида азота, измеренные на контрольных постах для выбранной даты.

Таблица 3. Значения концентрации диоксида азота (NO_2), измеренные на контрольных постах по состоянию на 17 октября 2006 г (19:00)

Концентрация NO_2, мг/м^3	Номер поста					
	2	4	5	7	9	14
реальная	0,05	0,17	0,16	0,07	0,27	0,05
смоделированная	0,0486	0,1663	0,1592	0,07	0,2624	0,0482

Используя указанный алгоритм, можно осуществить моделирование поля концентраций любого загрязняющего вещества с учетом динамики во времени. Также возможно осуществление краткосрочного прогнозирования полей концентраций вредных веществ в атмосферном воздухе.

Выводы

Предложенные зависимости и алгоритмы моделирования полей загрязнения по экспериментальным данным контрольных постов позволяют восстановить поля концентраций вредных веществ над значительными территориями. Это является важным при расчете фоновых концентраций загрязняющих веществ в атмосферном воздухе, на основе которых в проектной документации определяются объемы выбросов вредных веществ для отдельных источников.

РЕЗЮМЕ

Запропоновані математичні моделі розрахунку концентрацій забруднюючих речовин в атмосфері з урахуванням фонових концентрацій та динаміки вітру. Розроблено алгоритми відбудови полей концентрацій забруднюючих речовин за експериментальними даними контрольних постів спостереження.

SUMMARY

Mathematical models for calculation of contaminants concentration in the atmosphere taking into account the background concentration and wind dynamics are proposed. An algorithm for contaminants concentration fields' reconstruction, according to control observational stations experimental data, was developed.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Scire J.S., Strimaitis D.G., Yamartino R.J. A User's Guide for the CALPUFF Dispersion Model (Version 5). Earth Tech, Inc., Concord, January 2000.
2. Берлянд М.Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнение атмосферы. – Л., 1975. – 184 с.
3. Атмосферная турбулентность и моделирование распространения примесей / Под ред. Ф.Т.М. Ньистадта и Х. Ван Допа, 1985, Гидрометеоиздат. – 352 с.
4. Методика расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий. – ОНД-86. – Л.: Гидрометеоиздат, 1986. – 68 с.
5. Лыков А.В. Теория теплопроводности. – М.: Высшая школа, 1967. – 600 с.
6. GIS-Lab: Вычисление расстояния и начального азимута между двумя точками на сфере. / http://gis-lab.info/qa/great-circles.html, GIS-Lab, 2002-2007.
7. Бобров А.И., Аверин Г.В. Теоретические основы диффузии тепла, импульса и примеси в горных выработках. – Макеевка-Донбасс: Изд. МакНИИ, 1994. – 270 с.
8. Выгодский М.Я. Справочник по высшей математике. – М.: Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1956. – 784 с.
9. РД 52.04.186-89. Руководство по контролю загрязнения атмосферы.

Надійшла до редакції 16.10.2007 р.

УДК 504.55.054:622

ОЦЕНКА И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СОСТОЯНИЯ ГЕОЭКОЛОГИЧЕСКОЙ БЕЗОПАСНОСТИ ПОРОДНОГО ОТВАЛА ШАХТНОЙ ЭКОСИСТЕМЫ

А.Б.Ступин, И.Ю.Аревадзе

Известно, что геоэкологическая безопасность породных отвалов определяется геодинамическим состоянием или устойчивостью его откосов. Сложность и многообразие взаимодействия человека с окружающей средой при активном проявлении техногенеза выдвинули на первый план задачи оценки и прогнозирования состояния компонентов окружающей природной среды в связи с взаимодействием на них горных работ, а также безопасносью функционирования техногенных объектов и сооружений [1].

Оценка состояния откосов геотехногенного сооружения осуществляется в соответствии с задачами горно-экологического мониторинга предприятия [2].

Нами предложена методика оценки геоэкологической безопасностью шахтного отвала с учетом фаз деформирования его откосов. Исследования проводились на модельном породном отвале шахты «Трудовская»

Отвал №1 располагается на склонах распадка с углом наклона 32^0. Наклон тальвега верхней части долины составлял $15\text{-}20^0$, а нижней $7\text{-}12^0$. Проектная высота отвала составляет – 100 м. Схема породного отвала №1 шахты «Трудовская» представлен на рис 1.

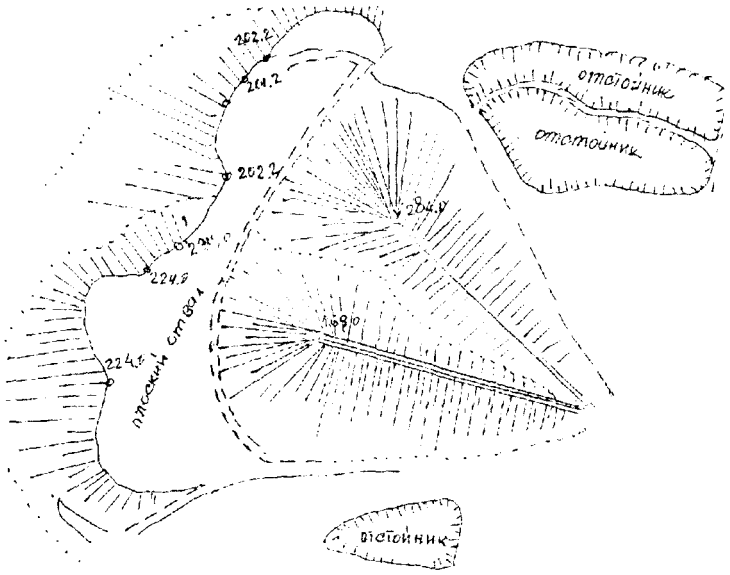


Рис. 1. Схема расположения отвала шахты «Трудовская»

Породы вскрыши, размещаемые в отвале, представлены преимущественно кремнистыми сланцами, песчаниками, алевролитами, габбро-диабазами. Средний размер куска отвальной массы составляет 180-200 мм. Средняя прочность пород на сжатие R_c=62 МПа, а средний угол откоса, полученный по результатам серии измерений составил 38,5°. Отсыпка отвала №1 производилась на склоны с углом 30-32°. Фиксирование деформационных процессов осуществлялось на протяжении всего времени отсыпки отвала. Наблюдения за вертикальными смещениями приоткосной зоны отвала велись по реперам на передвижных и стационарных наблюдательных станциях, закладываемых на бровках верхних площадок отвала. Схема наблюдательной станции отвала представлена на рис.2.

Периодическое определение высотных отметок реперов проводилось нивелированием по стандартной методике технического класса точности. Результаты наблюдений показали, что темпы деформаций на различных участках отвалобразования отличаются друг от друга. В приоткосной зоне рабочей площадки отвала деформации имели выраженный активный характер. Деформации вне фронта подвигания отвала – на уже сформированных откосах имели затухающий характер. График усредненной скорости деформирования отвала (V) на сформированных откосах вне фронта подвигания отвала приведены на рис. 3.

© Ступин А.Б., Аревадзе И.Ю.

Анализ деформаций отвала в начальном периоде позволил выявить главные негативные факторы, влияющие на геоэкологическую безопасность отвала, это крутой склон со слабыми породами в основании отвала, высота отвала и технологическое воздействие в форме подвигания фронта отвала [3].

Выявленная в результате исследований динамика вертикальных деформаций на рабочих площадках отвала характеризовалась двумя формами поведения: активной и пассивной.

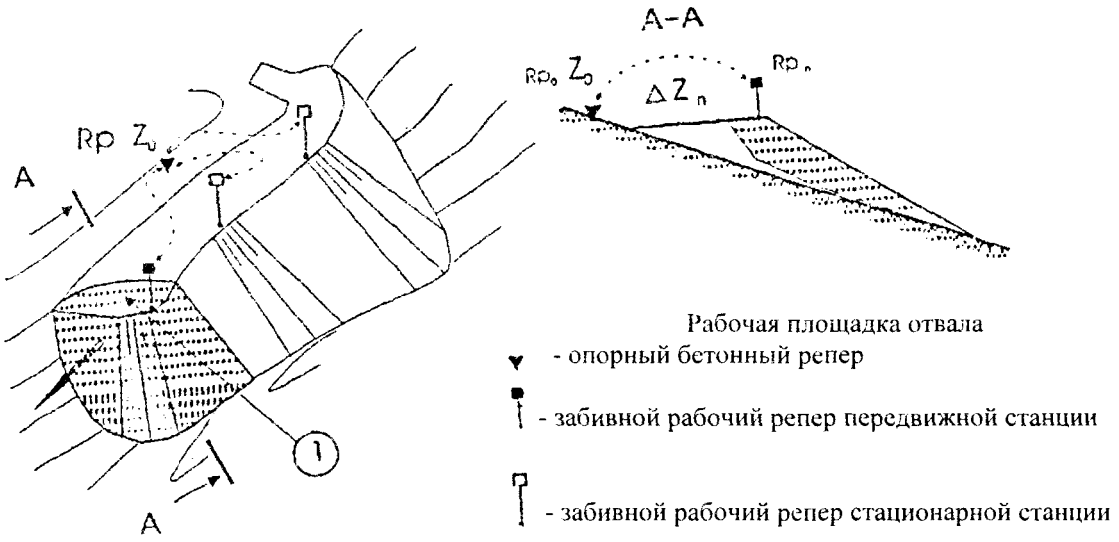


Рис. 2. Схема расположения рабочей площадки отвала и реперов (1 – рабочая площадка)

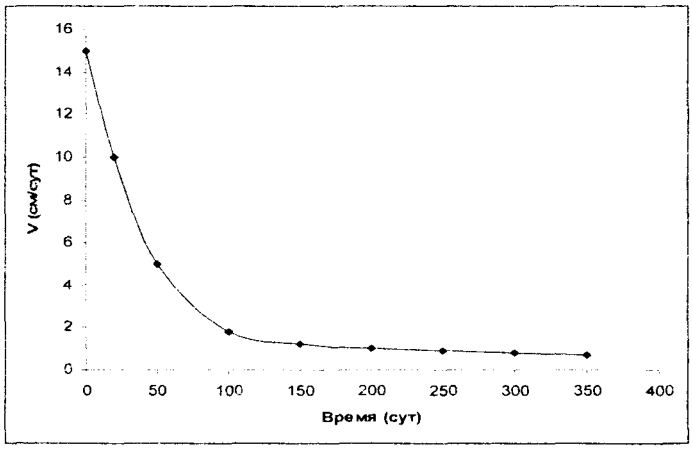


Рис. 3. Усредненная скорость вертикальных сдвиговых деформаций отвала на сформированных откосах вне фронта подвигания отвала

В процессе интерпретации результатов инструментальных наблюдений была установлена общая черта поведения отвального массива в активной форме, выразившаяся в цикличности динамических процессов.

Динамический цикл состоял из двух фаз: фазы разгрузки и фазы роста напряжений. Фаза разгрузки напряжений характеризовалась монотонным ростом значений скорости деформаций в определенном диапазоне значений и определенной продолжительности. Активная динамика деформирования рабочих площадок представлена на рис. 4.

Окончание фазы разгрузки напряжений и переход к фазе роста напряжений, как правило, характеризовались скачкообразным падением значений скорости вертикальных деформаций. Величина амплитуды падения скорости деформаций в фазе роста напряжений различна. Продолжительность фазы роста напряжений носила непродолжительный характер и включала несколько скачков падения значений скорости. После прохождения фазы разгрузки массив вновь вступал в фазу напряжения. Пассивная форма поведения не имела явно выраженной цикличности. Пассивная динамика деформирования рабочих площадок представлена на рис. 5.

В результате проведенного эксперимента были выявлены общие закономерности поведения отвала, которые можно охарактеризовать четырьмя геодинамическими состояниями рабочих площадок:

- *«УСТОЙЧИВОЕ – РАВНОВЕСНОЕ»;*
- *«НЕУСТОЙЧИВОЕ – НЕРАВНОВЕСНОЕ – КОНСТРУКТИВНОЕ»;*
- *«НЕУСТОЙЧИВОЕ – НЕРАВНОВЕСНОЕ -ДЕСТРУКТИВНОЕ»;*
- *« УСТОЙЧИВОЕ – НЕРАВНОВЕСНОЕ».*

Каждому состоянию динамического поведения породного отвала соответствовали определенные значения скоростей вертикальных деформаций и специфический характер их проявления. Характеристики состояний отвала представлены в табл. 1.

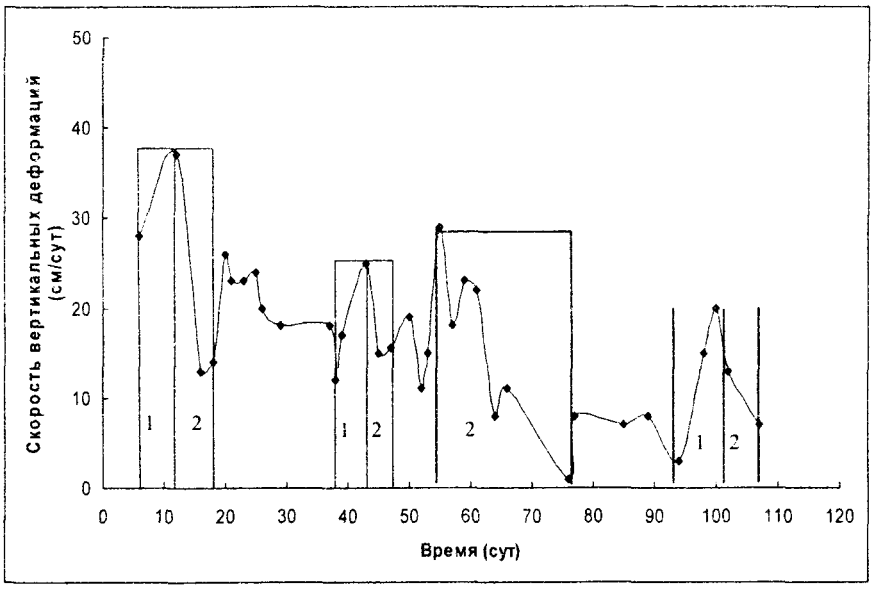


Рис. 4. Активная форма динамики деформирования рабочих площадок:
1 – фаза разгрузки напряжений; 2- фаза роста напряжений

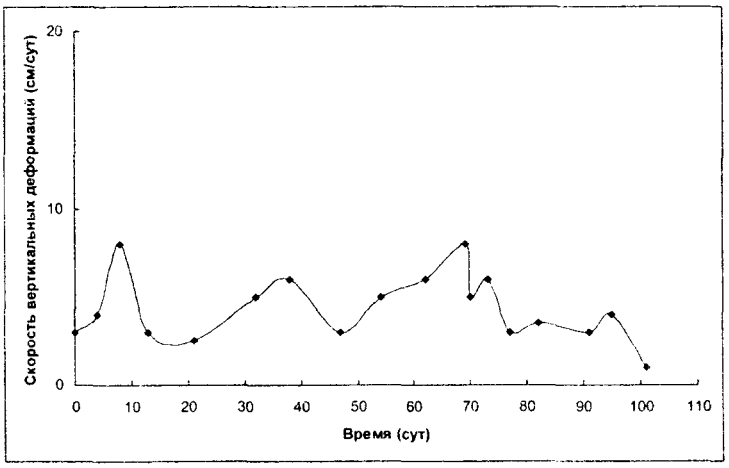


Рис. 5. Пассивная форма деформирования рабочих площадок

«УСТОЙЧИВОЕ— РАВНОВЕСНОЕ» состояние отвала характеризовалась следующими показателями: значения скоростей вертикальных смещений на рабочих площадках не превышают 10-12 см/сут, средняя их величина составляет 4-7 см/сут. Скачки деформаций редки, их амплитуда не превышает средних значений. Цикл «напряжение – разгрузка» не выраженный, условная средняя продолжительность его составляет 30-35 суток. Длительность фазы разгрузки напряжений составляет около 20-25 суток. Фаза роста напряжений длится в среднем 7-8 суток. Величина амплитуды падения скорости деформаций в фазе роста напряжений находилась в диапазоне от 6 до 2 см/сут.

Для оценки геодинамического состояния рабочих площадок отвала была использована экспоненциальная функция вида [3]:

$$V_в = ce^{r \cdot t},$$

где в качестве зависимой переменной выступает скорость деформаций $V_в$, аргументом t является время, а параметр r при аргументе t представляет собой показатель относительного изменения скорости деформаций. Для аппроксимации экспериментальных данных был использован метод наименьших квадратов.

Таблица 1.Характеристики динамического поведения деформационных процессов породного отвала

Состояния	Максимальное значение скорости вертикальных деформаций Vв, см/сут	Среднее значение скорости вертикальных деформаций Vв, см/сут	Средняя амплитуда падения скорости вертикальных деформаций фазы роста напряжений см/сут	Продолжительность цикла напряжение-разгрузка, сут.	Продолжительность фазы снижения напряжений, сут.	Значение и знак коэффициента r (относительное изменение скорости вертикальных деформаций)
«УСТОЙЧИВОЕ-РАВНОВЕСНОЕ» безопасное	10÷12	4÷7	2÷6	30÷35	20÷25	«–» 0,001÷0,03
«НЕУСТОЙЧИВОЕ-РАВНОВЕСНОЕ-КОНСТРУКТИВНОЕ» условно безопасное	35	15÷20	9÷11	8÷10	4÷5	«–» 0,03÷0,05
«НЕУСТОЙЧИВОЕ-НЕРАВНОВЕСНОЕ-ДЕСТРУКТИВНОЕ» условно опасное	35÷38	25÷30				«+» 0,03÷0,05
«УСТОЙЧИВОЕ-НЕРАВНОВЕСНОЕ» опасное	42	рост с ускорением !см/сут^2			30	«+» 0,05÷0,08

Расчет параметров функции изменения скорости вертикальных сдвиговых деформаций во времени был определен с помощью метода наименьших квадратов. Регрессионная зависимость между lnV и t имеет вид lnV= lnα + rt. Результат расчетов показал, что скорость вертикальных деформаций в среднем ежесуточно снижалась на 0,43%.

Это свидетельствует о *«УСТОЙЧИВОМ – РАВНОВЕСНОМ»*, безопасном геодинамическом состоянии отвала и о преобладании в массиве деформаций проседания. График скоростей вертикальных деформаций в *«УСТОЙЧИВО – РАВНОВЕСНОМ»* состоянии представлен на рис. 6.

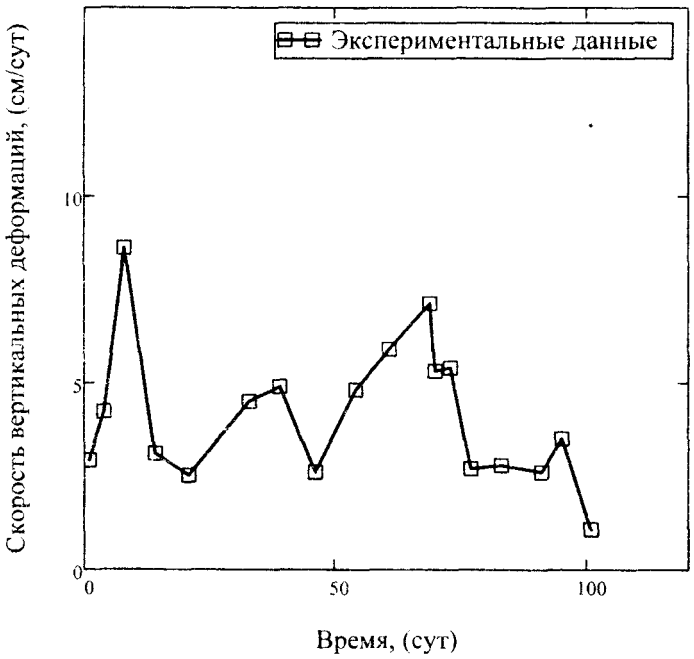


Рис. 6. График динамики скорости вертикальных деформаций в «устойчиво-равновесном» состоянии отвала

Процесс деформирования протекал без визуально прослеживаемых признаков смещения массива на поверхности рабочих площадок. Смещения фиксировались только инструментальными наблюдениями. Состояние геоэкологической безопасности нагорного отвала в состоянии *«УСТОЙЧИВОМ – РАВНОВЕСНОМ»* состоянии можно оценить как безопасное. В *«НЕУСТОЙЧИВОМ – НЕРАВНОВЕСНОМ»* состоянии динамика поведения отвала в течение исследуемого периода была не устойчивой. Максимальное значение скоростей вертикальных деформаций достигает 35-40 см/сут (табл. 1). Среднее значение скоростей вертикальных деформаций 15-20 см/сут.

Цикл «напряжение — разгрузка» длится в среднем 8-10 суток. Средняя продолжительность фазы роста и фазы разгрузки напряжений была примерно одинакова и составляла 4-5 суток. Амплитуда колебаний значений скоростей деформаций в фазе роста напряжений достигала 25 см/сут. Средняя величина амплитуды падения скорости деформаций составляла 10 см/сут. Динамические процессы носили неравномерный характер. Характеристики поведения отвала в зависимости его состояния представлены в таб. 1.

Результаты исследования изменения скорости деформаций показали, что текущее численное значение постоянного коэффициента r при показателе степени функции находилось в широком диапазоне от 0,01 – 0,09 (1 — 9 %) и имел знак как "–", так и "+". Показатель относительного изменения скорости деформаций в этой стадии был не постоянен как по величине, так по характеру проявления, что свидетельствовало о наличие в массиве как деформаций проседания, так и оползневых деформаций сдвига. Однако общая тенденция свидетельствовала о стабильном снижении скоростей вертикальных деформаций в среднем на 1,4 % в сутки, что указывало на *КОНСТРУКТИВНЫЙ* характер общего состояния отвала. График скоростей вертикальных деформаций в *«НЕУСТОЙЧИВОМ—НЕРАВНОВЕСНОМ- КОНСТРУКТИВНОМ»* состоянии представлен на рис. 7.

«НЕУСТОЙЧИВОЕ-НЕРАВНОВЕСНОЕ» состояние характеризовалась проявлениями визуально прослеживаемых признаков нарушения отвального массива горных пород на рабочей площадке. Продвижение фронта отвала сопровождалось периодическим появлением трещин и заколов, ступенчатых проседаний приоткосных участков.

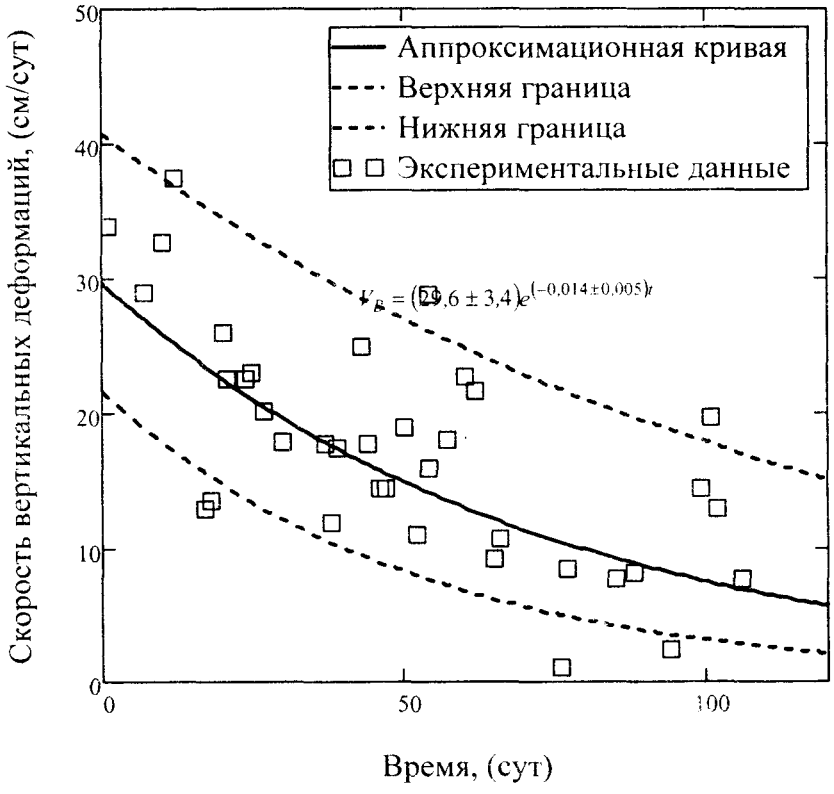


Рис. 7. График динамики скорости вертикальных деформаций в «неустойчиво-неравновесном», конструктивном состоянии отвала

В этом состоянии в массиве активно формируется оползневая поверхность скольжения. Трещины и заколы на поверхности рабочей площадки отвала оформляются в виде нескольких систем, как правило, в виде трех. Среди систем трещин, как правило, выделяется главная, с наибольшим раскрытием [4].

Состояние геоэкологической безопасности нагорного отвала в *«НЕУСТОЙЧИВОМ-НЕРАВНОВЕСНОМ»* состоянии в пределах скоростей вертикальных деформаций от 20 до 30 см/сут оценивалось как условно опасное, в этом же состоянии при скоростях вертикальных деформаций ниже 20 см/сут и обшей тенденцией к снижению скоростей деформаций оценивалось как условно безопасное. Инструментальные наблюдения на этой стадии проводились в зависимости от достигнутой скорости вертикальных смещений.

В *«УСТОЙЧИВОМ-НЕРАВНОВЕСНОМ»* состоянии скорости деформаций росли высокими темпами. В процессе наблюдения нами было зафиксировано максимальное значение скорости оседания, составившее 42 см/сут.

Инсгрументальными наблюдениями был установлен продолжительный однородный оползневой процесс разгрузки напряжения, который составил 30 суток. За этот период прирост скорости деформаций по абсолютному значению составил 38.4 см/суг, (от 4 до 42 см/сут) при средних темпах прироста скорости ~] см/сут. В фазе разгрузки напряжения имели место два незначительных скачка падения скоростей величиной 2-4 см/сут [5].

Результаты исследований этой зависимости показали, что численное значение показателя относительного изменения скорости г находится в диапазоне 0,05 — 0,08 (5 — 8 %) и имеет знак "+". Это свидетельствует об активной стадии динамического поведения отвала и о преобладании в массиве опасных сдвиговых деформаций деструктивного характера. Аппроксимированная экспоненциальная кривая, описывающая динамику процесса монотонная, круто наклонна. Начальную фазу динамики состояния (до скорости 30 см/сут) можно характеризовать как *«НЕУСТОЙЧИВУЮ - НЕРАВНОВЕСНУЮ -ДЕСТРУКТИВНУЮ»* в связи с тем, что состояние ее характеризовалось положительной динамикой роста скоростей деформаций, как реакцией системы на воздействие. При скорости выше 30 см/сут система перешла в *«УСТОЙЧИВОЕ - НЕРАВНОВЕСНОЕ»* состояние, при котором рост скорости вертикальных деформаций происходил линейно, не реагируя на приостановку горных работ на наблюдаемом участке. График скоростей вертикальных деформаций в *«НЕУСТОЙЧИВОМ -НЕРАВНОВЕСНОМ-ДЕСТРУКТИВНОМ»* состоянии с переходом в *«УСТОЙЧИВОЕ-НЕРАВНОВЕСНОЕ»* состояние представлен на рис. 8.

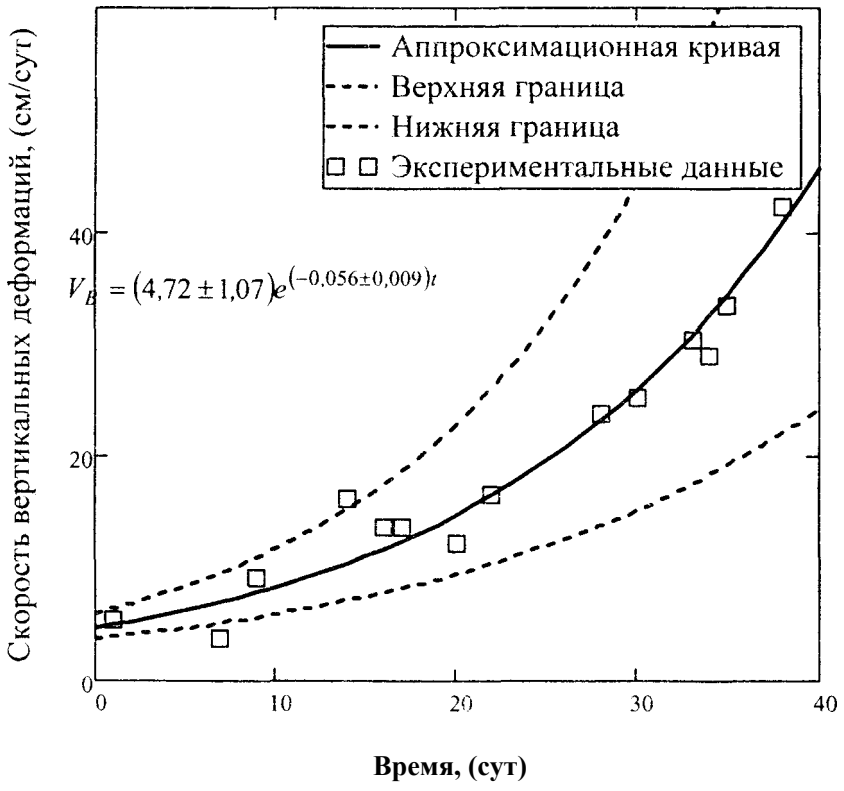


Рис. 8. График динамики скорости вертикальных деформаций в «устойчиво — неравновесном» состоянии слвала

На поверхности рабочей площадки отвала происходило оконтуривание оползневого массива замкнутыми .трещинами, среди которых можно было выделить основную трещину - трещину отрыва. До скорости деформаций 30 см/сут отвал находился в *«НЕУСТОЙЧИВОМ-НЕРАВНОВЕСНОМ-ДЕСТРУКТИВНОМ»* состоянии, которое было определено, как условно опасное. Работы по отвалообра-зованию в таких услови-

ях должны быть направлены на приостановление деструктивной тенденции. При скорости деформаций выше 30 см/сут отвал находился в *«УСТОЙЧИВОМ- НЕРАВНОВЕСНОМ»* геодинамическом состоянии, которое определено как опасное. Работы по отвалообразованию в таких условиях приостанавливались [6].

В условиях контролируемых мониторинговых наблюдений был зафиксирован оползневой процесс. По результатам наблюдений была определена критическая скорость вертикальных деформаций, которая составила для условий шахтной экосистемы – 30 см/сут. [7].

Таким образом, на основании экспериментальных результатов и оценки скорости вертикальных деформаций отвала горных пород шахты «Трудовская» предложены характеристики геоэкологического состояния безопасности породного отвала.

РЕЗЮМЕ

На підставі експериментальних результатів і оцінки швидкості вертикальних деформацій відвалу гірських порід шахти «Трудовська», запропоновані характеристики геоекологічного стану безпеки породного відвалу.

SUMMARY

Based on the experimental data and assessment of speed of vertical deformations at the mine «Trudovska» refuse heap, the characteristics of geoecological safety state of a refuse heap are given.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Королев В.А. Мониторинг геологической среды. – М.: Изд-во МГУ, 1995. – 272 с.
2. Табаченко Н.М. Геотехнология – горная наука о сбалансированном освоении георесурсов // Уголь Украины. – 2000. – №6.
3. Чуринова М.В., Емельянова Е.П., Хоситашвили Г.Р. Современные методы прогноза оползневого процесса. – М.: Наука, 1981. – 120 с.
4. Архипов Н.А., Ельчанинов Е.А., Горбачев Д.Т. Добыча угля и рациональное природопользование. – М.: Недра, 1987. – 285 с.
5. Певзнер М.Е., Костовецкий В.П. Экология горного производства. – М.: Недра, 1990. – 235 с.
6. Гильфанов М.Р. Классификация факторов, определяющих состояние микро-геодинамических систем // Горн. информ.-аналит. Бюл. – М.: Изд-во МГГУ, 2002. – №10. – С.61-62.
7. Крячко О.Ю. Управление отвалами открытых горных работ. – М.: Недра, 1980. – 255 с.

Надійшла до редакції 08.10.2007 р.

УДК 577.3: 504.75: 371.8

МЕТОДИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОЦЕНКЕ ПСИХИЧЕСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ СТУДЕНТОВ ПРОЖИВАЮЩИХ В РАЙОНАХ С РАЗЛИЧНЫМИ ЭКОЛОГИЧЕСКИМИ УСЛОВИЯМИ

О.С.Горецкий, Н.В.Говта, В.А.Максимович

Экологическая обстановка в техногенно трансформированных регионах, таких как Донбасс, очень напряженная [1]. Население этих территорий в течение длительного времени подвергается негативному воздействию различных антропогенно-экологических факторов, что сопровождается сложной социально-экономической ситуацией [2-4].

При воздействии факторов окружающей среды (физические, химические, информационные и др.), которые неадекватны адаптационным возможностям организма, происходят полисистемные регуляторные расстройства и функциональные изменения головного мозга [5, 6]. Это приводит к понижению устойчивости организма к самым разнообразным воздействиям и повышению вероятности заболеваний.

Уровень заболеваемости населения наиболее объективно характеризует степень влияния различных факторов окружающей среды [2, 7]. Психические расстройства и заболевания центральной нервной системы находятся в начале иерархического списка нозологий [7, 8]. Анализ состояния психофизиологических функций [8, 9] показывает, что наблюдается рост психических заболеваний, особенно среди молодёжи.

Психическая деятельность выполняет интегрирующую роль в образовании функциональных систем реагирования организма на изменяющиеся условия жизнедеятельности [10] и может служить одной из основных характеристик биоиндикации экологического состояния окружающей среды.

Для оценки сверхсложной динамической системы, которой является психическая деятельность человека, необходимы адекватные методы анализа параметров, характеризующих её состояние. Поэтому была поставлена цель – оценить психическую деятельность студентов, проживающих в районах с различными экологическими условиями для разработки методов её контроля.

Для достижения поставленной цели проведены исследования с участием 400 студентов, не состоящихна диспансерном учете и ведущих здоровый образ жизни. Обследуемые студенты постоянно проживали на территориях с различным уровнем экологической вредности, который определялся по разработанной шкале [11]. 300 студентов составили экспериментальную выборку, а 100 – контрольную (проверочную). Экспериментальная выборка состояла из 2 групп: первой, в которую входили студенты проживавшие более 10 лет на территориях с неблагоприятными экологическими условиями (180 человек), и второй – студенты, проживавшие более 10 лет на территориях с относительно благоприятными экологическими условиями (120 человек).

У обследуемых обеих групп определялись показатели функций, свойств и процессов, которые обеспечивают психическую деятельность: переключения, распределения, устойчивости и концентрации внимания по [12-14]; кратковременной зрительной и слуховой памяти, долговременной и оперативной памяти по [12-14]; времени принятия решений при выполнении задач различной сложности по [12-14]; силы нервных процессов по [13]; психо-эмоционального напряжения [15]; интелекта по [16, 17]; генеральной и текущей доминирующей мотивации по [18]; психофизиологической адаптивность при решении задач различной сложности по [19, 20].

Анализ полученных результатов показал, что большинство показателей (по скалярным величинам) у обследованных первой группы достоверно ($p<0,05$) ухудшилось по сравнению со второй группой.

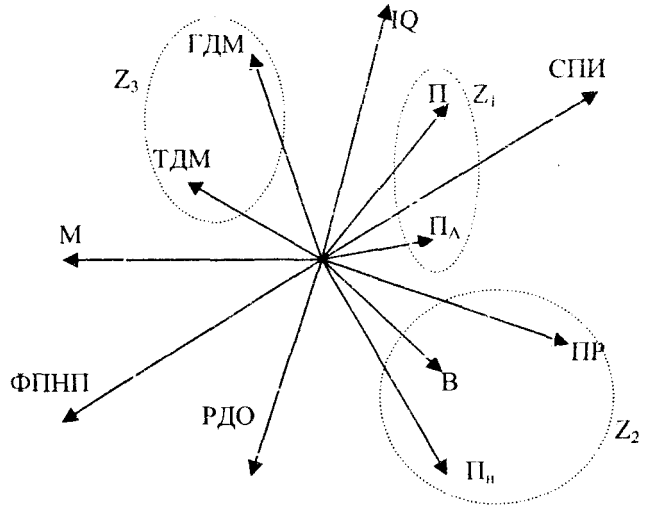
Однако использование скалярных величин не проясняет до конца динамику изучаемого явления. Поэтому все определявшиеся показатели (по скалярным величинам) объединялись в векторы по [21, 22]. Например, по показателям, характеризующим переключение, распределение, устойчивость и концентрацию внимания был построен обобщающий их вектор внимания. Аналогичным образом строились векторы памяти, адаптивности, принятия решений, мотивации и др.

Затем с помощью факторного анализа [21, 22] из построенных векторов были отобраны те, которые достоверно изменялись в зависимости от экологических условий проживания обследованных, и которые были относительно независимыми друг от друга. В результате из 12 векторов отобрано 7 информативно значимых, которые были сгруппированы по варимакс-критерию за 5 итераций в 3 фактора (рис. 1).

Как видно факторы и составляющие их векторы достоверно различаются между исследуемыми группами, однако этой информации не достаточно, чтобы однозначно оценить влияние изучаемых экологических условий на психическую деятельность человека.

Поэтому полученные векторные величины с помощью тензорного анализа [23] были преобразованы в тензорные. Это позволило определить взаимное расположение векторов внутри каждого фактора. Для перехода от векторных величин в тензорные использован тензор преобразования Крона рис.2.

© Горецкий О.С., Говта Н.В., Максимович В.А.



Z_1 – адапто-мнемический фактор; Z_2 – психодинамический фактор; Z_3 – мотивационный фактор; В – внимание; ПР – принятия решений; $П_н$ – психофизиологическая надежность; РДО –реакция на движущийся объект; ФПНП – функциональная подвижность нервных процессов; М – мышление; ГДМ – генеральная доминирующая мотивация; ТДМ – текущая доминирующая мотивация; СПИ – скорость переработки информации; П – память; $П_А$ – психофизиологическая адаптивность; IQ – коэффициент интеллекта.

Рис.1. Факторы и векторы психической деятельности

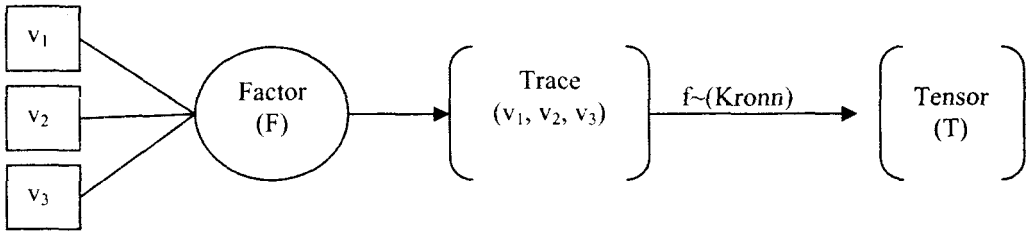


Рис.2. Преобразование фактора объединяющего векторы, в тензор

Определение взаиморасположения векторов внутри фактора проведено путём рассчёта их следов – Trace (v_1, v_2, v_3). Затем, с помощью функции тензора преобразования Крона – f~(Kronn) построен тензор (Т) третьей валентности с его численной характеристикой (программа для расчетов Matlab 7.0.0.). Валентность тензора определяется по количеству входящих в него векторов. В результате получены три тензора.

После этого можно было рассчитать взаиморасположение векторов в каждом тензоре психической деятельности. Пример такого взаиморасположения в одном из тензоров приведен на рис.3. Как видно из рисунка величина и взаиморасположение векторов психической деятельности в неблагоприятных экологических условиях достоверно отличается по сравнению с их взаиморасположением в относительно благоприятных экологических условиях.

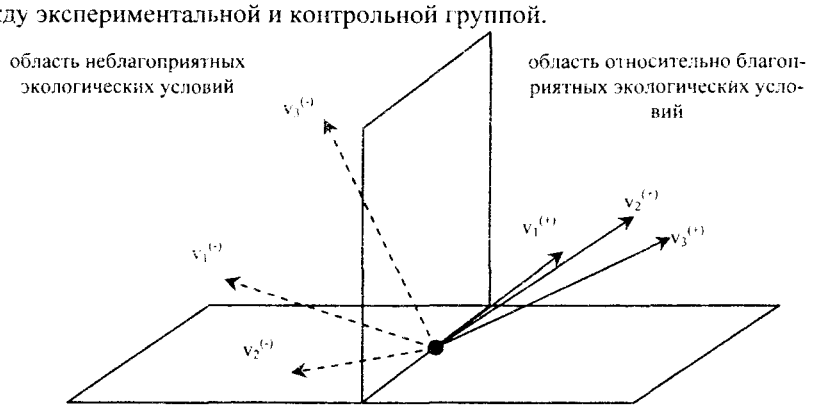
Как оказалось, для более точной оценки психической деятельности человека в различных экологических условиях необходим учёт не только взаиморасположения векторов, но и тензоров (смотри рис.4.). Как видно взаимное расположение тензоров психической деятельности проявляется в достоверном изменении их величины и угла наклона в результате влияния неблагоприятных экологических условий.

Проведение вышеуказанных анализов результатов исследований (векторный, факторный, тензорный) оказалось недостаточным для однозначной оценки такой сложной динамической системы, как психическая деятельность человека. Поэтому для характеристики динамики изменения совокупности тензоров был применен спинорный анализ [24]. В наших исследованиях спинор является результирующей векторов и тензоров психической деятельности и способен характеризовать их совокупное движение. На рис. 5 показано изменение спинора психической деятельности человека с ухудшением экологических условий его проживания.

Как видно, спинор из области относительно благоприятных экологических условий сместился на угол 100^0 относительно первоначального своего расположения.

Таким образом, изменение спинора в результате влияния экологических условий позволяет однозначно оценить ухудшение психической деятельности человека.

Сопоставление результатов анализа скалярных, векторных, тензорных и спинорных величин психической деятельности студентов, проживавших в различных экологических условиях, показало их совпадение ($p<0,05$) между экспериментальной и контрольной группой.



v_1, v_2, v_3 – соответственно векторы внимания, принятия решений, психофизиологической надежности.

Рис. 3. Взаиморасположение векторов внутри тензора

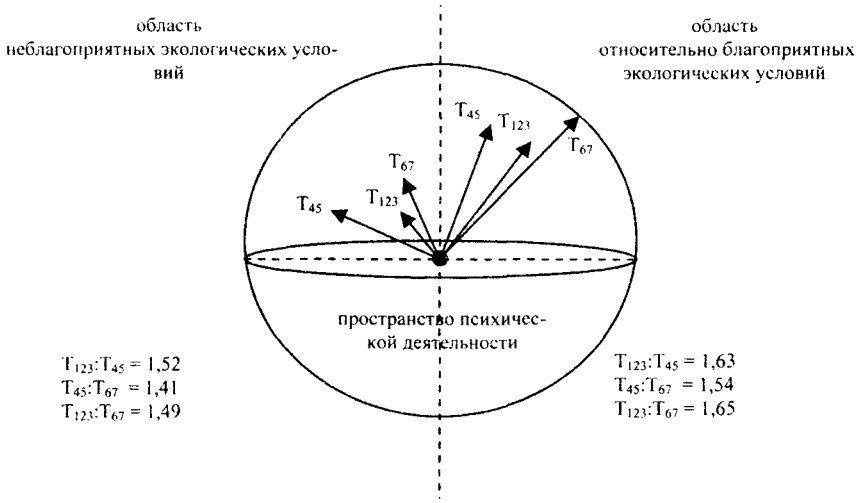


Рис. 4. Модель изменения тензоров психической деятельности человека в результате влияния экологических условий

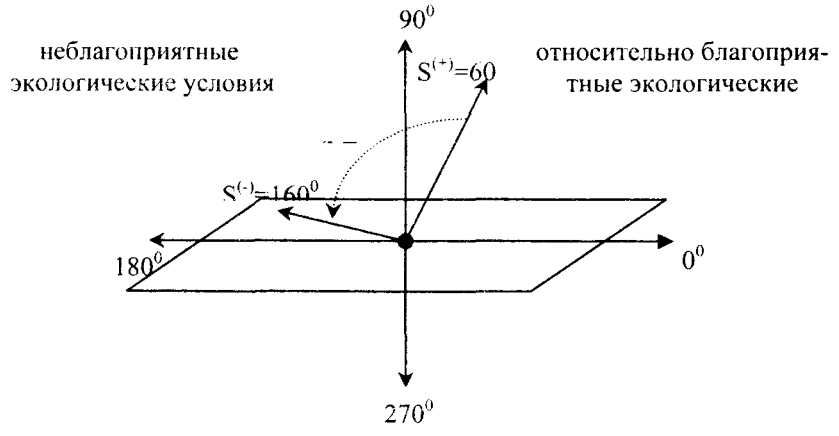


Рис. 5. Изменение спинора психической деятельности человека в результате влияния экологических условий

Выводы

1. Оценка влияния различных условий окружающей среды на сложные биологические системы организма и организм в целом, должна проводиться с использованием различных методов математического анализа.
2. Проведенный анализ психической деятельности человека позволил достоверно и однозначно оценить её ухудшение у студентов, проживавших в неблагоприятных экологических условиях.

РЕЗЮМЕ

З використанням векторного, факторного, тензорного та спінорного аналізів проведено оцінку психічної діяльності у студентів, які проживали на територіях з різними екологічними умовами.

SUMMARY

With use vector, factorial, tensor and spinor analyses the estimation of mental activity at the students living in territories with various ecological conditions is spent.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Земля тривоги нашої. За матеріалами доповіді про стан навколишнього середовища в Донецькій області у 2000-2005 році / Під. Ред. С. Куруленка. – Донецьк: Новий мир, – 2005. – 136 с.
2. Агарков В.И., Грищенко С.В., Грищенко В.П. Атлас гигиенических характеристик экологической среды Донецкой области. – Донецк: Донеччина, 2001. – 167 с.
3. Еремка Е.В. Окружающая среда и психическое состояние человека // Теория и практика физического воспитания. – 2004. – № 2. – С.149-155.
4. Экономические последствия неблагоприятного влияния окружающей среды на здоровье населения экокризисного региона Украины / И.И.Грищенко, И.И.Солдак, И.М.Нагорный и др. // Проблемы экологии и охраны природы техногенного региона. – Донецк: ДонНУ, 2006. – С.230-237.
5. Завьялов А.В. Соотношение функций организма (экспериментальный и клинико-физиологический аспекты). – М.: Медицина, 1990. – 160 с.
6. Бехтерева Н.П. Здоровый и больной мозг человека. – Л.: Наука, 1988. – 261 с.
7. Грищенко С.В. Комплексная гигиеническая оценка суммарного суточного поступления тяжелых металлов в организм жителей экокризисного региона / С.В. Грищенко, Н.В. Гринь, М.В. Степанова и др. // Довкілля та здоров'я. – 2004. – № 2. – С. 5-8.
8. Бундзен П.В., Евдокимова О.М., Унесталь Л. Современные технологии укрепления психофизического состояния и психосоциального здоровья населения (аналитический обзор) // Теория и практика физ. культуры. – 1996. – №8. – С. 57-63.
9. Кроха Н.В. Нервово-психічний розвиток як показник стану здоров'я дітей шкільного віку, що проживають за умов йодного дефіциту // Буков. мед. вісн. – 2002. – № 2. – С. 45-49.
10. Ильин Е.П. Психофизиология состояний человека. – СПб.: Питер, 2005. – 412 с.
11. Говта М. Вплив екологічно забрудненого довкілля на психічний стан студентів Донбасу // Донецький вісник Наук. тов-ва ім. Шевченка т. 14 – Донецьк: Східний видавничий дім. – 2006. – С. 40-45.
12. Кудинова Т.В., Максимович В.А. Психофизиологические аспекты безопасности труда горнорабочих. – М.: ЦНИЭИуголь, 1985. – 34 с.
13. Основы профессионального психофизиологического отбора / Н.В.Макаренко, В.А.Пухов, Н.В.Кольченко и др. – Киев: Наук. Думка, 1987. – 244 с.
14. Бурлюк А.В. Компьютерный тест «Внимание». ЗАО «Нейроком». 2000.
15. Блейхер В.М., Крук И.В., Боков С.Н. Практическая патопсихология: Руководство для врачей и медицинских психологов. – Ростов-н/Д.: Феникс, 1996. – 448 с.
16. Айзенк Г.Дж. Коэффициент интеллекта – К.: Изд-во Гранд, 1994.–112 с.
17. ЗАО «Нейроком». Тест интеллекта. 2001.
18. Хекхаузен Х. Мотивация и деятельность.(в 2-х томах). – М.: Педагогика, 1986.
19. Анастази А. Психологическое тестирование: Книга 2. Пер. с англ. / Под ред. Гуревича К.М., Лубовского В.И. – М.: Педагогика, 1982. – 234 с.
20. Оганезов А.С., Суменко О.В. Автоматизация исследования личности по психологической методике MMPI с синтезом словесного диагноза // Вопр. психол., 1990, №1. – С. 154-157.
21. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся в вузах. – М.: Наука, 1986. – 544 с.
22. Лаптев Г.Ф. Элементы векторного исчисления. – М.: Наука, 1975. – 224 с.
23. Нинул А.С. Тензорная геометрия. Теория и приложения. – М.: Мир, 2004, 336 с.
24. Рашевский П.К. Теория спиноров. Изд. 2-е. – М.: КомКнига, 2006. – 112 с.

Надійшла до редакції 20.11.2007 р.

УДК 581: 725.4: 712.4 (477.60)

СПЕЦИФІКА ФОРМУВАННЯ ФІТОГЕННИХ ПОЛІВ ДЕЯКИМИ ЕСТЕТИЧНИМИ ЕЛЕМЕНТАМИ АНТРОПОГЕННИХ ФЛОРОКОМПЛЕКСІВ

О.В.Голевич, А.І.Сафонов

Складна екологічна ситуація, яка є характерною для Донецького регіону, негативно відбивається на фізичному та психологічному стані людини. Зменшити здебільшого негативний вплив зовнішніх факторів та частково поліпшити стан навколишнього середовища здатні зелені насадження, роль яких в оптимізації довкілля не обмежується лише планетарними екологічними функціями, до яких належать процеси збагачення киснем, фільтрація повітря від пилу та шкідливих газів, іонізація та збільшення фітонцидів у повітрі тощо. Рослини, формуючи мікроклімат та виконуючи естетичну роль, суттєво унормовують психологічний дисбаланс людини. Вибір фітооб'єктів для озеленення промислово розвинутих міст має бути ретельним та функціонально обгрунтованим. Необхідно відзначити, що анропотехногенні екотопи є несприятливим середовищем для росту й розвитку багатьох рослин. Велика кількість високодекоративних видів не витримують несприятливих умов, втрачають свою естетичну привабливість, знесилюються та гинуть. Використання таких видів в озелененні стає марним і несе значні економічні збитки. Разом із тим, деякі види рослин, які спонтанно оселяються в місцях із значним антропотехногенним навантаженням, мають ряд структурно-фізіологічних, морфологічних і фітоценотичних пристосувань до складних умов існування і завершують повний генеративний цикл розвитку. Такі рослини набувають «нового специфічного естетизму», тобто характеризуються додатковими структурними новоутвореннями, що використовуються при комплексній естетичній оцінці території. До категорії таких рослин належать в першу чергу види природної флори регіону бур'янисто-рудеральної фракції та окремі «рослини-втікачі з культури» [1-6].

Мета роботи – на основі зведених даних про наявність певного рівня естетизму рослин в умовах антропогенно трансформованого середовища провести фракційний аналіз розподілення рослинних об'єктів за типіфікацією життєвих форм у аспекті побудови ними фітогенних полів.

У попередніх дослідженнях нами було акцентовано увагу на естетичній цінності деяких видів рослин природної флори південного сходу України в умовах промислового міста [7].

Задля існування у середовищі значної антропопресії рослини мають низку різноманітних пристосувань. З одного боку, це особливі риси побудови та фізіології рослинного організму, наприклад, анатомічні зміни в рослинному організмі (ксероморфна структура листків, занурення продихів у тканини листка, товста кутикула), опушеність, редукція листків, підвищення здібності до регенерації та відростання при пошкодженнях, швидкий та інтенсивний ріст або зменшення розмірів дорослої рослини [8]. З іншого боку, рослини територіально-стратегічно пристосовуються до складних умов існування. Наприклад, спроможність рослин захоплювати та утримувати площі заселення, взаємовідносини між рослинами в угрупуванні та ін. [7, 9].

Об'єкти та методи досліджень

Вивчено рослинні угрупування та поодинокі рослини – особини видів з територій, що зазнають значної дії антропогенного фактору. Специфіка дослідження полягала в обранні рослинних об'єктів, що виконують естетичну функцію за складних умов існування.

Дослідження проведено протягом у вегетаційні сезони 2006 та 2007 рр. у Донецькій області. Маршрути досліджень (див. табл. 1) складалися у відповідності до типології антропогенно змінених місцезростань, яку розроблено на основі класифікації М.Л. Реви та схеми антропогенних міських екотопів у відділі природної флори Донецького ботанічного саду Національної академії наук України [10].

Нами було приділено багато уваги дослідженню взаємовідносин між рослинами, а саме як одна рослина змінює, або взагалі утворює, середовище існування для іншої. Доцільним було вивчення фітогенних полів рослин. Фітогенне поле – частина простору, в межах якої середовище набуває нових властивостей, що визначаються присутністю в ньому даної особини рослини [11]. При дослідженні фітогенних полів найбільше значення надавали таким параметрам середовища як освітлення, накопичення вологи, рослинних залишків та пилу. Зміна цих параметрів залежить від морфологічної структури та розміщення пагонів у просторі.

З урахуванням характеру розміщення наземних органів виділяють моно-, полі- та ацентрічні життєві форми рослин.

Моноцентричні біоморфи характеризуються наявністю одного центру впливу рослини на середовище.

Таблиця 1. Схема маршрутних досліджень

№ п/п	Екотопи	Місце знаходження екотопу
1.	власно техногенні екотопи	▪ центральна збагачувальна фабрика шахти ім. Засядько
2.	селітебні екотопи	▪ вулиці: — вул. Щорса – вул. Рози Люксембург, — пр-т Ватутіна – вул. Університетська – Київський пр-т, — вул. Обнорського – вул. Засядько – вул. Собінова; — набережна р. Кальміус (Нижнє- та Верхнєкальміуське водосховища); ▪ майданчик біля Донецької державної обласної адміністрації; ▪ пам'ятник визволителям Донбасу в парку «ЛЕНКОМ»
3.	екотопи з повністю зміненим едафотопом	▪ відвал шахти «Бутівка-Донецька» (зараз – шахта «Путилівська»); ▪ відвал шахти «Острівська» (Мар'їнський р-н, Донецька обл.)
4.	екотопи шляхів сполучення	▪ залізна дорога біля станції Гострий (~ 1 км) (Мар'їнський р-н, Донецька обл.); ▪ локальні ділянки вздовж автодоріг м. Донецьк

Поліцентричні – кількома, які можуть бути пов'язаними між собою комунікаційними органами (кореневищами, коренями, столонами тощо).

Ацентричні життєві форми рослин не мають явних центрів впливу на оточуюче середовище і відповідно, характеризуються однаковою напруженістю фітогенного поля за всією площею, що займає рослина [12].

Результати та обговорення

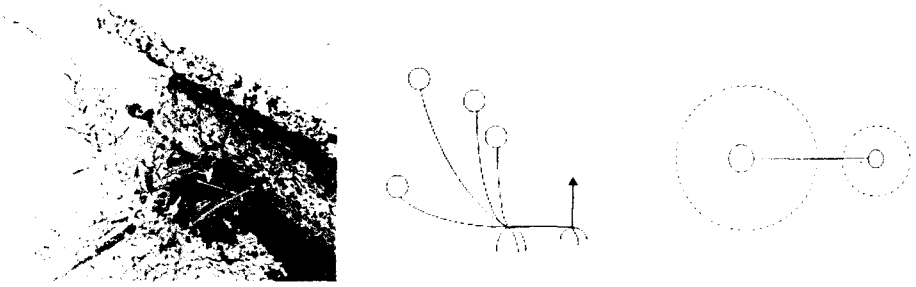
Внаслідок проведених досліджень були визначені життєві форми 240 особин рослин, що представлено 30 видами.

Фракційний аналіз розподілення усієї вибірки за групами представлено в тал. 2. Було побудовано схеми фітогенних полів досліджуваних окремих особин видів та рослинних угрупувань. Результати досліджень відображають залежність кількості видів з визначеною життєвою формою від умов існування.

Таблиця 2. Фракціонування варіативності життєвих форм рослин за фітогенними полями

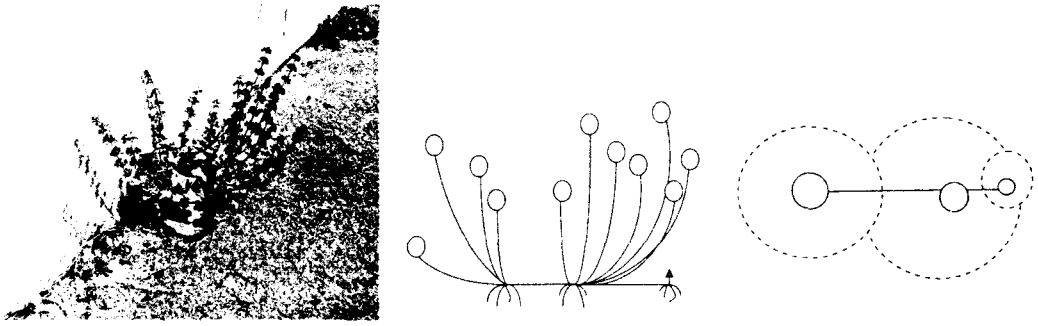
№ п/п	Екотопи	Моноцентричні життєві форми		Ацентричні життєві форми		Поліцентричні життєві форми	
		кількість видів, шт.	кількість особин, шт.	кількість видів, шт.	кількість особин, шт.	кількість видів, шт.	кількість особин, шт.
1.	власно техногенні екотопи	3	10	2	4	2	7
2.	селітебні екотопи	9	40	7	44	6	38
3.	екотопи з повністю зміненим едафотопом	4	18	3	8	8	27
4.	екотопи шляхів сполучення	7	15	2	11	6	18
Загальна кількість		12	83	6	67	12	90

Для екотопів з повністю зміненим едафотопом, для яких характерними, окрім інших факторів, рухливість субстрату та сильні вітри, переважаючими є види рослин з поліцентричними біоморфами. Найчастіше це довгокореневищні та дерновинні рослини, підземні органи яких міцно фіксують особини у грунті і, таким чином, зумовлюють їх існування у даних умовах. Здебільшого поліцентричні життєві форми є домінантами рослинних угрупувань, що сформовано на схилах териконників (див. рис. 1, 2).



А Б В

Рис. 1. Явнополіцентрична життєва форма. ***Achillea stepposa* Klokov et Krutzka – деревій степовий.** Парк імені Ленінського комсомолу. Пам'ятник визволителям Донбасу (А – зовнішній вигляд рослини, Б – схема життєвої форми, В – схема будови фітогенного поля).

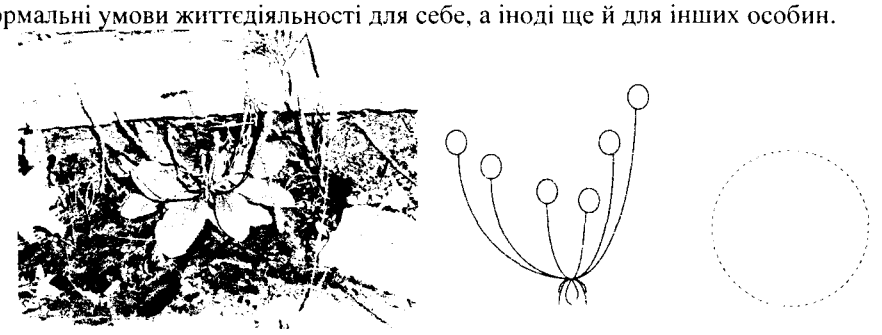


А Б В

Рис. 2. Неявнополіцентрична життєва форма. ***Salvia verticillata* L.- шавлія кільчаста.** Парк ім. Ленінського комсомолу (А – зовнішній вигляд рослини, Б – схема життєвої форми, В – схема будови фітогенного поля).

У районах з щільною забудівлею, які відносять до селітебних екотопів, рослини оселяються у щілинах між камінням та цеглинами, розколинах в асфальті, шпаринах між тротуаром та стіною, де можуть збиратися пил та ґрунтові частки. Деякі види оселяються на пам'ятниках, балконах, дахах, у стінах будівель. За таких умов вплив рослини на середовище є мінімальним. Саме просторове обмеження, зумовлене суцільним покриттям ґрунту асфальтом, тротуарною плиткою, каменем перешкоджає широкому розповсюдженню видів, що мають поліцентричні життєві форми. Переважаючими формами тут є в рівній мірі як моноцентрики, так і ацентрики. Слід відзначити, що ацентричні (див. рис. 3) життєві форми найбільш розповсюджені в селітебних екотопах, ніж в інших антропотехногенних екотопах. Можна припустити, що це пов'язано з відсутністю жорсткої конкуренції між видами за місця існування за даних умов.

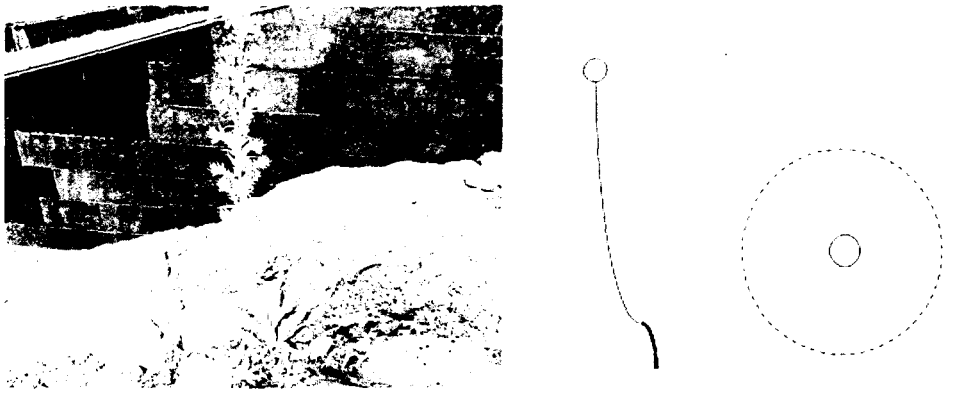
Одним з обмежуючих факторів поширення рослин в екотопах шляхів сполучення виступає висока щільність субстрату. Це пояснює наявність великої кількості моноцентричних біоморф в даному екотопі. Найчастіше до моноцентричних життєвих форм належать багаторічні види з добре розвинутою стрижневою кореневою системою, яка дозволяє рослинам глибоко проникати в щільні шари ґрунту. Домінування моноцентриків в селітебних екотопах зумовлене наявністю добре розвинутого наземного пагону – головної вісі рослини. Розвинута наземна частина дозволяє рослині накопичувати достатню кількість вологи, рослинних залишків, ґрунтових частинок безпосередньо в області своєї кореневої системи, чим забезпечує нормальні умови життєдіяльності для себе, а іноді ще й для інших особин.



А Б В

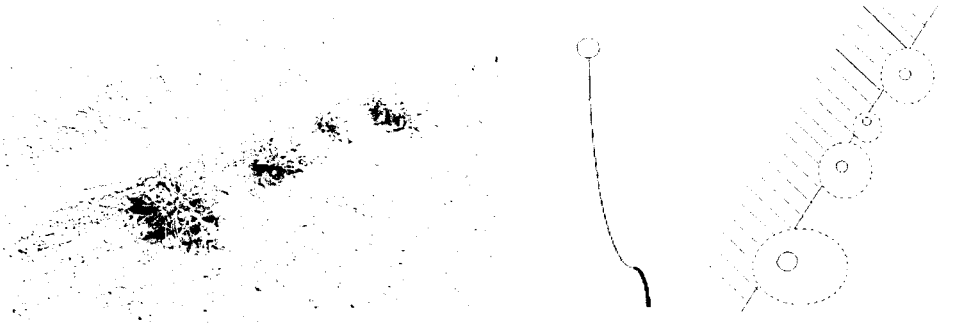
Рис. 3. Ацентрична життєва форма. ***Plantago major* L. – подорожник великий.** Парк імені Ленінського комсомолу. Пам'ятник визволителям Донбасу. Між плитками сходів (А – зовнішній вигляд рослини, Б – схема життєвої форми, В – схема будови фітогенного поля)

У всіх типах антропотехногенних екотопів переважаючими є моноцентричні життєві форми (див. рис. 4, 5). Виключення становлять лише екотопи з повністю зміненим едафотопом, тут найбільше розповсюдження отримали поліцентричні біоморфи (53,3% від загальної кількості видів досліджених в даному екотопі).



А Б В

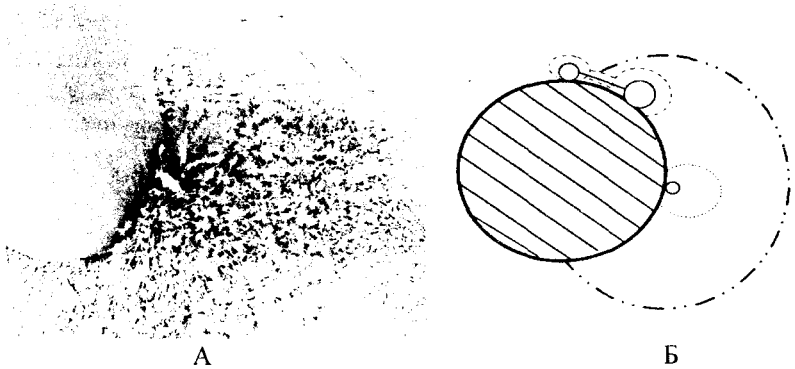
Рис. 4. Моноцентрична життєва форма. ***Echium vulgare* L. – синяк звичайний.** Парк ім. Ленінського комсомолу. Пам'ятник визволителям Донбасу (А – зовнішній вигляд рослини, Б – схема життєвої форми, В – схема будови фітогенного поля)



А Б В

Рис. 5. Група моноцентричних життєвих форм. ***Diplotaxis muralis* (L.) DC. – дворядник муровий.** Вулиця Щорса. Розщілина між стіною будинку та асфальтом (А – зовнішній вигляд рослини, Б – схема життєвої форми, В – схема будови фітогенного поля).

На рис. 6 представлено угруповання, де наявні усі три типи життєвих форм.



А Б

Рис. 6. Типи життєвих форм рослин. Група рослин: ***Taraxacum officinale* Web. ex Wigg. – кульбаба лікарська,** ***Medicago romanica* Prod. – люцерна румунська, *Elytrigia repens* (L.) P.B. – пирій повзучий.** Київський проспект. Розщілина в асфальті біля стовпа (А – зовнішній вигляд рослин, Б – схеми будов фітогенних полів).

Отже, вивчення фітогенних полів за умов аналізу життєвих форм рослин дає розуміння про деяку трансформацію рослиною оточуючого середовища та фітоценотичного пристосування рослин до складних екологічних умов. Для окремих типів екотопів визначено домінуючі життєві форми, чому гіпотетично складено ботаніко-екологічне пояснення.

РЕЗЮМЕ

Представлен фракционный анализ жизненных форм растений по специфике формирования отдельными видами фитогенных полей в условиях промышленного региона. Составлены схемы фитогенных полей типичных представителей антропогенных экотопов Донецкой городской агломерации.

SUMMARY

The fractional analysis of vital forms of plants on the specifics of formation by separate kinds of phytogenic fields in the industrial region has been presented. The schemes of phytogenic fields of typical representatives of anthropogenic ecotopes of the Donetsk municipal agglomeration have been composed.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Ткаченко В.М. Методика кваліфікаційної експертизи сортів квітково-декоративних рослин на поширення в Україні. – К.: Б.в, 2003. – 134 с.
2. Данильчук В.Ф., Бовсуновская А.Я., Голубничая С.Н. Методика оценки рекреационных объектов и территорий. – Донецк: Б.и., 2001. – 107 с.
3. Борейко В.Е. Введение в природоохранную эстетику. – Серия: охрана дикой природы. – Вып. 14. – 1999. – 128 с.
4. Декоративные растения открытого и закрытого грунта. – К.: Наук. думка, 1985. – 664 с.
5. Ханбекова. Нормы допустимых рекреационных нагрузок // Временная методика определения рекреационных нагрузок на природные комплексы. – М.: Б.и., 1987. – 124 с.
6. Сікура Й.Й., Капустян В.В. Інтродукція рослин. – Київ: Фітосоціоцентр, 2003. – 230 с.
7. Голевич О.В., Сафонов А.І. Естетична цінність деяких видів рослин природної флори південного сходу України в умовах промислового міста. – Мат. наук. конф. «Охорона навколишнього середовища та раціональне використання природних ресурсів». – (Донецьк, 17-19 квітня 2007 р.). – Донецьк: ДонНТУ, 2007. – С. 172-174.
8. Ліхолат Ю.В., Кучма В.М., Семенко А.В., Антоненко Н.О.Зміни анатомічної будови листків основних дерноутворюючих трав в умовах промислового забруднення // Питання біоіндикації та екології. Вип. 7, № 1. – Запоріжжя, 2002. – С. 3-9.
9. Жизнь растений: Введение, бактерии и актиномицеты. – Т. 1. – М.: Просвещение, 1974. – 487 с.
10. Глухов А.З., Хархота А.И., Назаренко А.С., Лиханов А.Ф. Тератогенез растений на юго-востоке Украины / Донецкий ботанический сад НАН Украины. – Донецк: Норд-Пресс, 2005. – 179 с.
11. Уранов А.А. Фитогенное поле // Проблемы современной ботаники. I. 1965. – С. 251-254.
12. Серебрякова Т.И., Воронин Н.С., Еленевский А.Г., Батыгина Т.Б., Шорина Н.И., Савиных Н.П. Ботаника с основами фитоценологии: Анатомия и морфология растений. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. – 543 с.

Надійшла до редакції 13.11.2007 р.

УДК 628.15

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА БИОЛОГИЧЕСКОЙ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД ОТ МИНЕРАЛЬНОГО АЗОТА

А.Б.Ступин, М.В.Бескровная, В.С.Оверко, С.Л.Литвиненко,*
Институт физико-органической химии и углехимии им.Л.М.Литвиненко НАН Украины

Обычно биологическое удаление минерального азота из сточных вод с участием активного ила включает два процесса: окисление ионов аммония до нитрат-ионов (нитрификация) и, затем, восстановление последних до молекулярного азота (денитрификация) [1]. Оба эти процесса весьма сложны и включают несколько стадий каждый с промежуточным участием соединений азота во всех возможных степенях окисления от -3 до +5. Суммарные химические уравнения рассматриваемых процессов передаются уравнениями 1 и 2.

$$NH_4^+ + 2O_2 \rightarrow NO_3^- + 2H^+ + H_2O, \quad (1)$$

$$8NO_3^- + 5CH_3COOH \rightarrow 4N_2 + 10CO_2 + 6H_2O + 8OH^-. \quad (2)$$

Естественно, что эти процессы осуществляют различные виды микроорганизмов. Нитрификаторы – это хемолитоавтотрофные аэробные бактерии. Денитрификаторы представляют собой гетеротрофные микроорганизмы, действующие как в аноксидных, так и в анаэробных условиях. Эти обстоятельства, в основном, определяют общий дизайн очистных сооружений -- создание тем или иным способом аэробных и анаэробных зон, разделенных в пространстве (раздельные аэробные и анаэробные биореакторы) или во времени (попеременное создание кислородных и бескислородных условий в одном и том же реакторе). К последнему типу относятся т.н. реакторы с последовательной загрузкой (Sequencing Batch Reactor, SBR) [2,3]. При лабораторных исследованиях процессов, протекающих в таких реакторах, было обнаружено явление, названное одновременной нитрификацией-денитрификацией, ОНД [2]. Суть его состоит в том, что при концентрациях растворенного в воде кислорода до ~2 мг/л, т.е. в условиях, не очень благоприятных для микробиологической денитрификации, последняя протекает с заметной скоростью параллельно с нитрификацией. При этом общая степень удаления из воды минерального азота может превышать 90%.

Обоснование возможности протекания ОНД заключается в существовании внутри флокул активного ила или в объеме биопленки градиента концентрации кислорода, что приводит к появлению аноксидных микрозон (рис.1). При этом даже при заметных концентрациях растворенного кислорода в объеме жидкости, в глубинных слоях флокул существуют условия для микробиологической денитрификации [4].

Целью настоящей работы было исследовать и количественно промоделировать процессы, протекающие при микробиологическом удалении из воды примесей, содержащих минеральные формы азота, в проточном реакторе непрерывного действия (рис. 2).

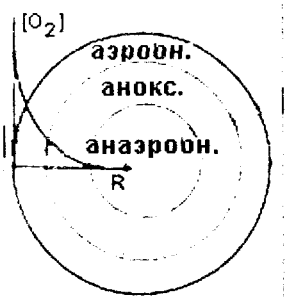


Рис.1. Схематическое изображение зависимости концентрации кислорода от расстояния R от поверхности сферической флокулы

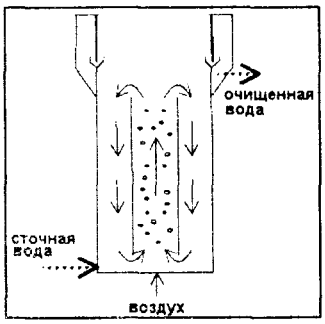


Рис.2. Схематическое изображение проточного реактора (стрелками внутри реактора показано направление движения водно-флокулярной смеси)

Для достижения этой цели была разработана математическая модель ОНД в проточном реакторе непрерывного действия, схематически изображенном на рис.2, определены основные факторы, влияющие на эффективность суммарного процесса, а также экспериментально проверены полученные закономерности.

Целью модели является описание поведения водорастворимых ингридиентов в объеме жидкой и флокулярной фаз путем расчета скоростей биохимических реакций и их концентрационных профилей. В процессе создания модели сделан ряд допущений:

© Ступин А.Б., Бескровная М.В., Оверко В.С., Литвиненко С.Л.

- флокулы имеют сферическую форму;
- флокула движется в потоке (рис.2), т.е. ее скорость относительно жидкости равна нулю и массоперенос вблизи флоккулы осуществляется только за счет диффузии;
- транспорт химических веществ внутри флокулы осуществляется за счет молекулярной диффузии, причем значения коэффициентов диффузии в водной и флокулярной фазах совпадают и являются постоянными величинами;
- сопротивление массопереносу через поверхность раздела между жидкостью и флокулой пренебрежимо мало;
- изменением численности популяций микроорганизмов за время, соответствующее максимальному расчетному времени (1.38 час) можно пренебречь;
- реакции подчиняются кинетическим уравнениям химических реакций соответствующих порядков;

Исследуемая область разбивалась на две части: непосредственно флокула сферической формы диаметром (75-300) мкм и окружающая среда кубической формы с длиной ребра 500 мкм. Соотношение между диаметром флокулы и длиной ребра выбиралось таким образом, чтобы объем флокулы был в ~10 раз меньше объема окружающей среды. Принимается, что химические реакции протекают только внутри флокулы (источниковые слагаемые имеются только для области внутри флокулы). Расчетные уравнения имеют следующий вид:

А) в окружающей среде:

$$\frac{\partial C1}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 C1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C1}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C1}{\partial z^2}\right)$$

$$\frac{\partial C2}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 C2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C2}{\partial z^2}\right)$$

$$\frac{\partial C3}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 C3}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C3}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C3}{\partial z^2}\right)$$

Б) внутри флокулы:

$$\frac{\partial C1}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 C1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C1}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C1}{\partial z^2}\right) - k1C1^2C2$$

$$\frac{\partial C2}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 C2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C2}{\partial z^2}\right) - k2C1^2C2$$

$$\frac{\partial C3}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 C3}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C3}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C3}{\partial z^2}\right) + \frac{k3C1^2C2}{1+C1}$$

где D – коэффициент диффузии, равный 1.49 10^{-5} $см^2/с$, а C_i концентрации кислорода (C1), аммония (C2) и нитрата (C3). Так как процессы, протекающие в соседних ячейках подобны, то на границах расчетной области можно принять условия изоляции (симметрии; i =1, 2, 3):

$$\vec{n}\cdot\vec{N} = 0, \quad где \quad \vec{N} = -D\,grad C_i$$

Численно задача решалась методом конечных элементов на основе алгоритма неполной LU-факторизации разреженной матрицы.

Выражения для скоростей химических реакций r_k введены на основании законов химической кинетики и стехиометрии процессов нитрификации и денитрификации.

$$\frac{d[O_2]}{dt} = \frac{d[NH_4]}{dt} = -k_1[NH_4][O_2]^2$$

$$\frac{d[NO_3]}{dt} = \frac{k_2[NO_3]}{1+[O_2]}$$

Из анализа литературных данных [1] были выбраны значения $k_1 = 0.1 M^{-1}c^{-1}$ и $k_2 = 0.01\ c^{-1}$. Для простоты было принято, что исходная вода не содержит нитрат-ионов; начальная концентрация ионов аммония составляет 2 ммоль/л. Концентрация растворенного кислорода в расчетах варьировалась в пределах 0.5 – 2.75 ммоль/л.

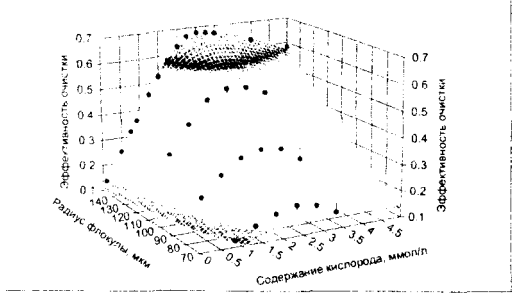


Рис. 3. Зависимость эффективности микробиологической очистки воды от минерального азота от концентрации растворенного кислорода при различных размерах флокул

Результаты расчетов представлены в графическом виде на рис.3. В соответствии с представлениями, развитыми ранее [1,4] о механизме одновременной нитрификации-денитрификации (ОНД), эффективность удаления из воды минерального азота имеет экстремальный характер в зависимости от концентрации растворенного кислорода при всех исследованных размерах флокул. При этом эффективность возрастает с увеличением радиуса сферической флоккулы.

Мы провели прямую экспериментальную проверку[1] достоверности разработанной математической модели ОНД. Влияние размеров флокул на эффективность очистки исследовали в лабораторном непроточном реакторе. Активный ил, взятый из действующей установки по очистке бытовых сточных вод в пгт. Новый Свет, характеризуется фракционным составом, изображенным на рис.4 (определено седиментационным методом). Проведение процесса ОНД с таким илом характеризуется эффективностью ~52% (рис. 5).

[1] Все экспериментальные измерения проводили в соответствии с методиками, приведенными в [5].

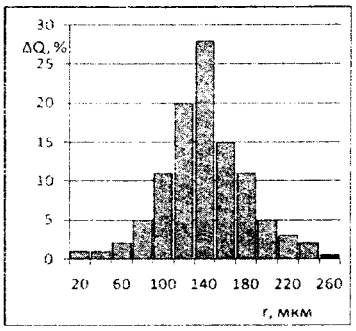


Рис. 4. Распределение флокул свежего активного ила по размерам

При интенсивном механическом перемешивании в течение 30 мин. Размеры флокул уменьшаются, при этом эффективность очистки снижается до ~30% (рис. 6).

Влияние на эффективность удаления минерального азота концентрации растворенного кислорода исследовали в полномасштабном аэротенке действующего очистного сооружения. Полученные результаты представлены на рис.6. Как видно из этого рисунка, экстремальная зависимость степени очистки сточной воды от минеральных соединений азота хорошо согласуется с расчетными данными.

Таким образом, предложенная в настоящей работе математическая модель удовлетворительно передает экспериментальные данные по эффективности удаления из сточных вод минерального азота и может быть использована при проектировании очистных сооружений и оптимизации их эффективности.

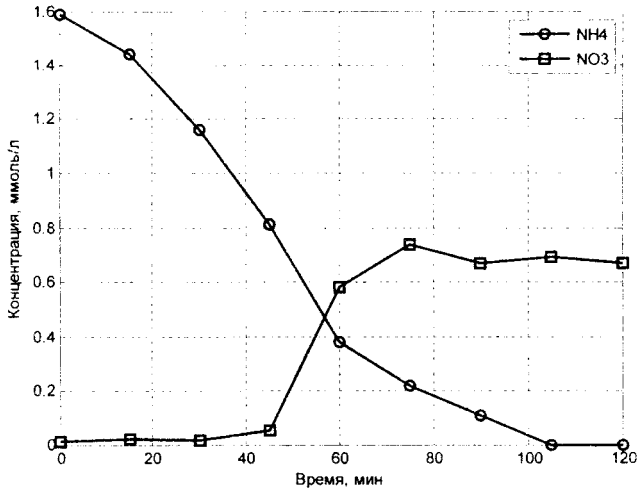


Рис.5. Изменение концентраций форм минерального азота в реакторе ОНД во времени. Средний размер флокул составляет ~140 мкм. Исходная вода имела следующие характеристики – [NH_4-N] = 23 мг/л, общ. ХПК 204 мг/л, концентрация растворенного кислорода - 2,5 мг/л)

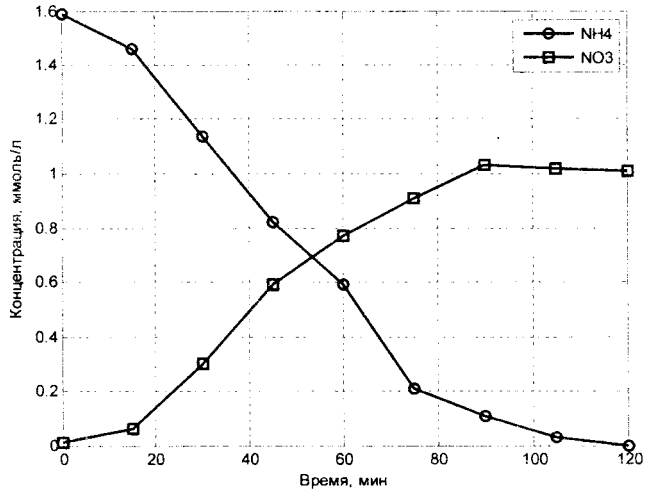


Рис.6. Изменение концентраций форм минерального азота в реакторе ОНД во времени. В - средний размер флокул ~100 мкм. Исходная вода имела следующие характеристики – [NH_4-N] = 23 мг/л, общ. ХПК 204 мг/л, концентрация растворенного кислорода - 2,5 мг/л)

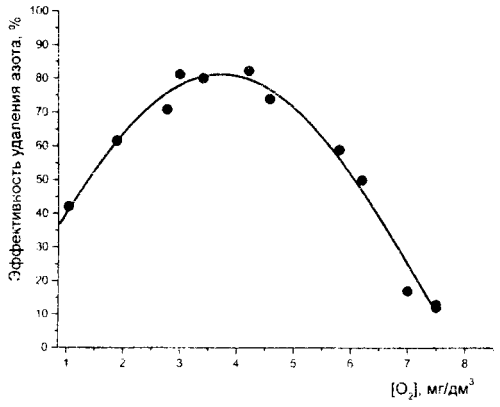


Рис. 7. Зависимость эффективности удаления минерального азота в действующем аэротенке в зависимости от концентрации растворенного кислорода

РЕЗЮМЕ

Розроблено математичну модель процесу біологічного очищення стічних вод від сполучень мінерального азоту флокулами активного мулу в проточному реакторі безперервної дії. Оцінки в рамках цієї моделі ефективності очищення залежно від розміру флокул і концентрації розчиненого в об'ємі рідини кисню задовільно збігаються з експериментальними даними.

SUMMARY

The mathematical model for the process of biological sewage sanitation of mineral nitrogen with active flock sludge in a cross-flow reactor of continuous operation is developed. Estimations of clearing efficiency depending on the flock size and dissolved oxygen concentration in bulk liquid well agree with experimental data within the framework of the model.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хенце М., Армоэс П., Ля-Кур-Янсен Й., Арван Э. Очистка сточных вод. – М.: Мир, 2006. – 480 с.
2. Munch E.V., Lant P., Keller J., Simultaneous nitrification and denitrification in bench-scale sequencing batch reactors. Water Research, 1996, 30, p.277-284.
3. Keller J., Subramanium K., Gosswein J., Greenfield P.F., Nutrient removal from industrial wastewater using single tank sequencing batch reactors. Water Science and Technology, 1997, 35, p.137-144
4. Pochana K., Keller J., Model development for simultaneous nitrification and denitrification. Water Science and Technology, 1999, 39, p.39-61.
5. Лурье Ю.Ю. Аналитическая химия промышленных сточных вод. – М.: Химия, 1984. – 448 с.

Надійшла до редакції 26.04.2007 р.

УДК 632.15:631.416.8

СВИНЕЦ В ВОЗДУХЕ ГОРОДА ДОНЕЦКА

Г.И.Жерякова

Среди загрязняющих веществ в воздушном бассейне городов важное место занимают металлы, большинство из которых относится к I и II классам опасности. Они способны кумулироваться в организме, а также в смесях с другими загрязняющими веществами (NO, NO_2, NH_3, SO_2, H_2S, CO и др.), при воздействии физических факторов (шум, вибрации, электромагнитное излучение) взаимно усиливать отрицательное воздействие друг друга. Огромное значение имеет запыленность воздуха. Нагрузка на живые организмы при вдыхании растет как с увеличением запыленности воздуха, так и содержания химических элементов в пыли. Это обусловливает поступление большого количества металлов в организм даже при небольшой запыленности воздуха.

Ранее нами проводились исследования содержания в почвах города Донецка свинца и кадмия [1-3], которые показали высокую степень загрязнения почв этими металлами и поэтому нежелательность выращивания сельскохозяйственной продукции в пределах города. В настоящей работе мы попытались оценить загрязненность атмосферного воздуха города свинцом.

Важный источник поступления свинца в окружающую среду – современная промышленность. Выделение его в результате сжигания каменного угля на протяжении XX столетия увеличилось в 6 раз [4]. Кроме того, к основным источникам выбросов свинца в окружающую среду относятся автомобильный транспорт, полиграфия, производство аккумуляторов, кабеля, цветная металлургия и масса других слабо изученных источников. Эмиссия в атмосферу свинца по сравнению с другими металлами происходит особенно активно благодаря выбросам в воздух выхлопных газов двигателей внутреннего сгорания. Неравномерность распределения его в биосфере усиливается в результате производственной деятельности человека. Основная часть техногенного свинца аккумулируется в почвенном покрове, связываясь с минеральными и органическими компонентами почвы, в растительности в непосредственной близости от источника загрязнения, другая мигрирует в воздушном пространстве, подчиняясь закономерностям турбулентной диффузии. Таким образом, опасность антропогенной эмиссии свинца заключается не в глобальном загрязнении всей биосферы, а в больших поступлениях выбросов его на ограниченные участки территории.

Известны общие закономерности нахождения свинца в атмосфере: более высокое содержание его водорастворимых форм в осадках теплого периода по сравнению с холодным; относительно близкие или даже несколько повышенные концентрации свинца в твердых атмосферных аэрозолях фоновых районов по сравнению с промышленными, но не производящими свинца, а также увеличение его концентраций в атмосферных пылевых выпадениях в периферических частях промышленных районов по сравнению с центральными, характеризующимися максимальным выпадением пыли [4].

Изменения содержания вредных веществ в воздушном пространстве неравномерны и зависят от расположения источников загрязнения, метеорологических условий и топографических факторов [2,4]. Значительная часть свинца из городской пыли переходит в растворимое, подвижное состояние, так как подвижность металлов резко увеличивается в водной среде (под действием атмосферных осадков), в присутствии растительности, кислотных дождей (сульфатов) в техногенных районах. Пылегазовые выбросы приводят к распространению свинца в атмосфере, к загрязнению воздуха и через органы дыхания – к биоконцентрированию в живых организмах. Содержание его в атмосфере городов связано с количеством населения: в городе с населением более 2 млн. среднее содержание свинца в 2 раза выше, чем в городе с количеством жителей менее 100 тыс. человек.

Примерное фоновое содержание свинца в атмосфере, по ряду оценок, составляет 0,0006 мкг/м^3. Такие уровни в обжитых районах сейчас практически не наблюдаются. Даже в заповедниках центральной части Европейской территории, на расстоянии 50-100 км от городов содержание свинца в воздухе варьирует в пределах 0,003-0,016 мкг/м^3. Средняя величина (0,006 мкг/м^3) принимается за фоновый уровень при оценке загрязнения воздушного бассейна городов [4]. ПДК свинца в воздухе 0,3 мкг/м^3.

Распределение свинца в воздушных потоках меняется очень быстро. Коэффициент вариации содержаний достигает 200% и более. Определение содержания металлов в атмосфере воздуха из-за трудоемкости отбора проб, сложности их анализа на широкий спектр химических элементов фронтально, как правило, не проводится. Поэтому широко развиваются исследования по установлению корреляционных соотношений типа выброс-выпадения, воздух-выпадения. Многочисленными исследованиями установлены количественные связи между содержанием металлов в атмосферном воздухе и выпадением их на территории городов (почва, снежный покров, которые более доступны для изучения). Эти работы позволяют по более статичному параметру выявить зоны опасного влияния источников загрязнения, оценить

© Жерякова Г.И.

состояние воздушного бассейна, представить пространственную структуру загрязнения, что практически невозможно при прямом изучении содержания свинца в атмосфере.

Уровни загрязнения городских почв тяжелыми металлами (ТМ) определяются характером и интенсивностью атмосферных выпадений.

На основании результатов исследований содержания металлов в атмосферном воздухе и почвах выявлены количественные связи между их концентрациями в этих сопредельных средах. Разработаны зависимости между содержанием ТМ в воздухе и валовых, обменных, подвижных, водорастворимых форм их в верхнем слое (0-5 см) почв. Установлены наиболее достоверные корреляции, достигающие в отдельных случаях коэффициента 0,99. Такие корреляции характерны именно для свинца. Объясняется это тем, что свинец – самый малоподвижный металл в системе почва-растение среди ТМ. Он поступает в городские почвы, в основном, через атмосферу (в особенности с автомобильными выхлопами) и, оседая, прочно удерживается почвенным поглощающим комплексом в верхних горизонтах почвы.

Для свинца известны несколько уравнений регрессий, например:

$y = 1263x + 4,9$ [5];
$y = 840x + 165$ [6].

В этих уравнениях установлена зависимость содержания свинца в воздухе от валового его количества в почве, хотя в [6] это не уточняется, можно только предполагать.

Наиболее достоверной (с коэффициентом корреляции 0,99) является зависимость содержания обменной формы свинца в верхнем слое почвы (0-2см) от среднего многолетнего его содержания в приземной атмосфере города:

$y = 87,2x + 1,96$ [7],

где y – содержание обменных форм свинца в почве, мкг/г; x – содержание свинца в приземной атмосфере, мкг/м^3.

Последнее уравнение было выбрано нами для расчетов при исследовании загрязненности атмосферного воздуха города Донецка свинцом. Обменные формы свинца в почвах определяли по [8]. Результаты этих определений и рассчитанные концентрации свинца в воздухе различных зон города представлены в таблицах 1 и 2.

Автомобильный транспорт является наиболее важным источником загрязнения города свинцом, так как соединения свинца выбрасываются с выхлопными газами прямо в зону дыхания человека. Чтобы оценить опасность нахождения пешеходов на тротуарах, транспортных остановках, пробы почвы отбирали в придорожных зонах (на расстоянии от проезжей части дороги 1-5 м) (табл.1). Для оценки загрязненности свинцом атмосферного воздуха в зонах отдыха, проживания горожан пробы отбирались на удаленных от автодорог участках (на расстоянии 500-2000м) (табл. 2). Наибольшее количество проб отбирали в центральных районах города, где выше плотность населения и интенсивнее автомобильные потоки.

Таблица 1.Загрязнение свинцом атмосферного воздуха вблизи автомобильных дорог в административных районах города

Название района	Кол-во Проб	Содержание обменных форм Pb в почве		Содержание Pb в воздухе		Кол-во проб с содерж.Pb в воздухе ≥ ПДК
		Диапазон кон-ций, мг/кг	Среднее содерж., мг/кг	Диапазон кон-ций, мг/кг	Среднее содерж., мг/кг	
Ворошиловский	20	9,1-53,3	22,3	0,08-0,53	0,23	4
Калининский	8	7,2-51,9	23,7	0,06-0,57	0,25	2
Киевский	18	4,6-25,5	16,6	0,03-0,27	0,17	0
Ленинский	11	15,8-37,3	22,1	0,15-0,40	0,23	2
Кировский	5	10,5-24,4	17,7	0,01-0,26	0,18	0
Куйбышевский	11	8,6-57,4	25,7	0,08-0,41	0,27	5
Буденновский	4	21,4-27,4	24,4	0,22-0,29	0,25	0
Пролетарский	3	11,2-17,4	14,3	0,11-0,18	0,14	0
Петровский	3	13,2-17,0	15,1	0,13-0,17	0,15	0
По городу	83	4,6-57,4	20,2	0,03-0,57	0,21	7

Наиболее загрязненными свинцом по нашим данным (табл. 1) являются Куйбышевский, Ворошиловский, Калининский, Ленинский районы. Средние значения концентраций свинца в воздухе этих районов, как и в целом по городу, не превышают ПДК, но близки к ней. В этих районах обнаружены зоны, где концентрации свинца превышают ПДК. В Ворошиловском районе это автостанция «Центр», ул.Щорса в районе Театрального проспекта, переулка Орешкова; проспект Павших Коммунаров; в Куй-

бышевском районе – улица Югославская в районе КХЗ, самые низкие точки по улице Одинцова и проспекту Панфилова; проспект Панфилова в районе больницы № 17, улица Югославская в районе КХЗ; в Калининском районе – улица Левобережная в районе мотодрома, проспект Мира в районе шахты Калинина; в Ленинском районе – Мариупольская развилка, улица Куприна в районе гормашзавода. Особое место занимает Буденновский район. Здесь не обнаружены участки с концентрацией свинца выше ПДК. Но диапазон концентраций узок (0,22-0,29 мкг/м^3), а среднее значение выше, чем в Ленинском и равно этому значению в Калининском районе. Проб почвы в Буденновском районе отобрано меньше, чем в центральных районах, но все же можно сделать ориентировочный вывод, что воздух в этом районе достаточно высоко и равномерно загрязнен свинцом.

Таблица 2. Загрязнение свинцом атмосферного воздуха в удаленных от автодорог зонах административных районов города

Название района	Кол-во проб	Содержание обменных форм Pb в почве		Содержание Pb в воздухе	
		Диапазон кон-ций, мг/кг	Среднее содерж., мг/кг	Диапазон кон-ций, мкг/м^3	Среднее содерж., мкг/м^3
Ворошиловский	4	8,5-11,5	9,6	0,07-0,11	0,09
Калининский	2	5,8-6,4	6,3	0,04-0,06	0,05
Киевский	4	5,0-7,8	6,6	0,03-0,06	0,05
Ленинский	3	6,8-9,2	7,9	0,05-0,08	0,06
Кировский	4	5,3-6,2	5,6	0,04-0,05	0,04
Куйбышевский	3	8,5-9,2	9,0	0,07-0,09	0,08
Буденновский	2	7,2-8,2	7,7	0,06-0,07	0,07
Пролетарский	2	5,2-5,6	5,4	0,04	0,04
Петровский	2	5,3-6,1	5,7	0,04-0,05	0,04
По городу	26	5,0-11,5	7,1	0,03-0,11	0,06

Загрязнение свинцом воздуха в удаленных от автодорог местах города значительно ниже, чем в придорожных (табл.1,2), но на порядок выше принимаемого обычно фонового значения (0,006 мг/м^3). Диапазоны концентраций свинца в воздухе во всех районах города значительно уже, чем в воздухе вблизи дорог. Средние значения концентраций в Ворошиловском, Куйбышевском, Ленинском, Буденновском районах выше, чем в других.

Выводы

1. Атмосферный воздух города Донецка в высокой степени загрязнен соединениями свинца. Концентрации их на участках, примыкающих к автомобильным дорогам, значительно выше, чем на удаленных от дорог.
2. Наиболее загрязненными административными районами являются Ворошиловский, Куйбышевский, Буденновский, Ленинский и на придорожных участках – Калининский.
3. Загрязнение воздуха в зонах, удаленных от автодорог, приблизительно на порядок выше принимаемого фонового.

РЕЗЮМЕ

Проведена оцінка забруднення атмосферного повітря міста Донецька свинцем. Дані про концентрацію свинцю в повітрі різних точок міста розраховані по рівнянню регресії, яке зв'язує вміст свинцю в грунтах та повітрі. Визначені найбільш забруднені адміністративні райони та частини міста.

SUMMARY

Evaluation of pollution of atmospheric air in Donetsk city with lead is carried out. Data on lead concentration in the air in different parts of the city is calculated based on the regression equation, which connects contents of lead in soils and in the air. The most polluted regions and zones of the city are determined.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ступин А.Б., Жерякова Г.И., Лозовой В.М. Экологические проблемы автотранспорта в г. Донецке и Донецкой области / Вісник ДонНУ, 2004. Серія А. Природничі науки. – № 1, ч.2. – С.442-448.
2. Ступин А.Б., Жерякова Г.И., Лозовой В.Н. Влияние выбросов автомобильного транспорта на загрязнение почв города Донецка свинцом / Вісник ДонНУ, 2005. Серія А. Природничі науки. № 1, ч.2. – С. 334-339.

3. Ступин А.Б., Жерякова Г.И. Кадмий в почвах города Донецка / Вісник ДонНУ, 2006. Серія А. Природничі науки. № 1, ч.2. – С. 394-398.
4. Свинец в окружающей среде. – М.: Наука, 1987. – 181 с.
5. Артемов В.М., Парцеф Д.П., Сает Ю.Е. и др. Анализ состояния загрязнения снегового покрова для проектирования сети станций АНКОС-А. В кн.: Методические и системотехнические вопросы контроля загрязнения окружающей среды // Труды ИМПГ, 1982. Вып.48. – С. 144-149.
6. Геохимия окружающей среды. – М.: Недра, 1990. – 335 с.
7. Тютюнник Ю.Г. О зависимости содержания тяжелых металлов в городских почвах от уровня загрязнения атмосферы // Агрохимия, 1992. № 7. – С. 25-27.
8. Временные методические рекомендации по контролю загрязнения почв / Под ред. Малахова С.Г. Ч.1. – М.: Гидрометеоиздат, 1983. – 82 с.

Надійшла до редакції 15.05.2007 р.

УДК 631.95: 632.15

ВЛИЯНИЕ УГЛЕДОБЫВАЮЩЕЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ НА АГРОСФЕРУ

Ю.К.Бородай,
Донецкий институт агропромышленного производства УААН, канд.хим.наук

Добыча угля, его обогащение и использование создают предпосылки для воздействия аэральных полютантов, ксенобиотиков из сбрасываемых шахтных вод, экотоксикантов, мигрирующих из отходов (породные отвалы) на агроландшафты. Наибольшую техногенную нагрузку в угольной промышленности на агроландшафты оказывают породные отвалы (терриконы). На территории Донецкой области размещено ~ 600 отвалов шахт и углеобогатительных фабрик, из которых 130 горящих [1] . В состав аэральных эмиссий с терриконов, постоянно рассеивающихся в приземном слое, входят диоксид серы, оксиды азота, сероводород, органические токсиканты, углепородная и угольная пыль, содержащая в своем составе соединения тяжелых металлов, селена, мышьяка, фтора и др. [2, 3]. Эти соединения захватываются агробиогеноценозами с негативными последствиями для агроландшафтов и, соответственно, производимой продукции.

Поэтому целесообразно было изучить техногенную трансформацию агроландшафтов и накопление экотоксикантов (тяжелых металлов, нитратов, фторидов) в сельхозпродукции. Исследования проводили в Шахтерском районе Донецкой области, как одном из представительных угледобывающих регионов.

В почвах, воде и сельхозпродукции проведено определение содержания ряда нормируемых компонентов: ртути, свинца, цинка, меди, железа (общ.), стронция, фторидов и нитратов.

Валовое содержание тяжелых металлов, стронция и железа в воде и биологических материалах определяли методом атомно-абсорбционной спектроскопии [4]. Воду из колодцев отбирали в соответствии с ГОСТом 24481-80 [5]. Почву отбирали в слое 0-20 см по ГОСТ 17.4.4.02.84 [6]. Для определения содержания валовых форм тяжелых металлов почву разлагали кислотным способом смесью $HCl+HNO_3+HF$ с конечным растворением остатка в разбавленной HNO_3 [4]. Растительные образцы озоляли методом сухой минерализации [7].

Для элементного анализа минерализатов использовали атомно-абсорбционный спектрофотометр КАС-120.1 с электротермической атомизацией, источник излучения лампы типа ЛТ-2. Содержание ртути в воде определяли после минерализации перманганатом – пероксибисульфатом калия, восстановления ртути (II) хлорным оловом (II) в моноатомном парообразном состоянии методом беспламенной атомно-абсорбционной спектрометрии при длине волны 253,7 нм [8]. Массовую концентрацию нитратов и фторидов определяли потенциометрически с использованием ион-селективных электродов [9, 10].

Защитная функция почвы, определяющаяся в основанном содержанием органической составляющей и pH, в условиях постоянной техногенной нагрузки на агроекосистемы за счет аэральних эмиссий с терриконов (рисунок) снижается. При понижении буферности почвы в ряде случаев усиливается действие экотоксикантов. Данные показывают (рисунок), что как с действующих, так и недействующих отвалов в атмосферу выбрасываются в основном, пыль, диоксид серы, оксиды азота. Массовая доля компонентов (%) в аэральных эмиссиях определяется процессами происходящими в породной массе.

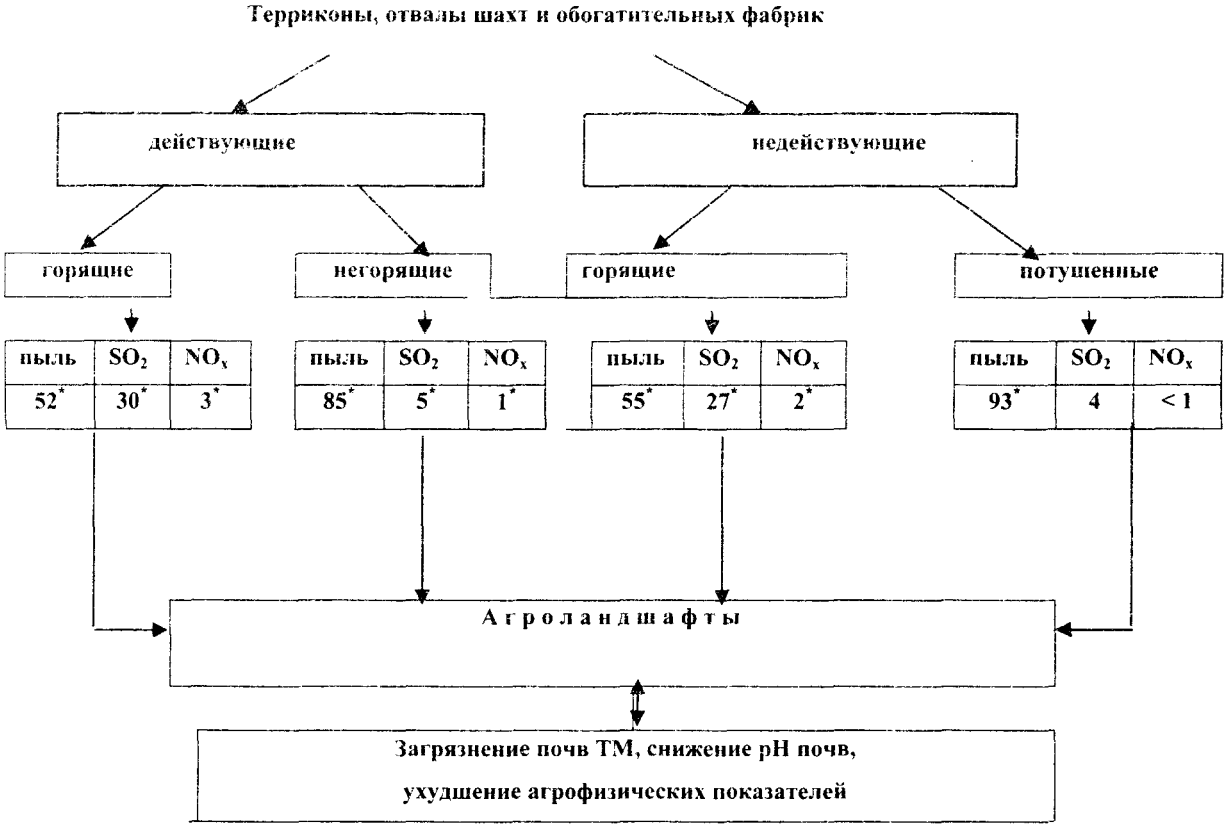
Гидролиз, окислительно-восстановительные процессы в углепородной массе терриконов приводят к образованию органических и неорганических кислот, а также подвижных форм тяжелых металлов. Избыток кислых компонентов в составе аэральных эмиссий с терриконов обуславливает подкисление почв вокруг них на расстоянии более 14 км (табл. 1).

Таблица 1. Влияние аэральных эмиссий с терриконов на кислотность почв

Угледобывающий регион	Валовые выбросы, тыс. т/год			pH* почв	Гумус, %	Тип черноземов
	пыль	SO_2	NO_x			
Шахтерский	4,7	3,8	0,4	5,7 (5,1-6,6)	4,2(2,9-5,6)	щебневатые
Красноармейский	6,4	7,7	0,9	6,7(6,2-6,9)	5,4(5,0-7,6)	обыкновенные среднегумусные
Кировское	0,6	0,9	0,1	6,5 (6,0-6,9)	6,1(5,2-7,5)	типичные среднегумусные

* - в скобках приведен интервал значений pH и гумуса почвы по району, перед скобками – среднее значение.

© Бородай Ю.К.



* - массовая доля компонента в аэральной эмиссии (%)

Рис. Агроландшафты под воздействием аэральных эмиссий с терриконов

Причем понижение pH почвы зависит от содержания в ней гумуса. Так, в Красноармейском районе, несмотря на большие валовые выбросы кислых компонентов, pH почв выше, чем в Шахтерском районе, что обусловлено более высоким содержанием гумуса и, следовательно, буферностью почвы.

Шахтерский район по почвенно-климатическим условиям относится к восточной микрозоне. Это зона значительной водной и ветровой эрозии. Почвы, в основном, черноземы щебневатые на элювии плотных бескарбонатных пород, которым присущи коркообразование, заплывание, быстрое пересыхание. Содержание гумуса находится в интервале 2,9-5,6 %. Анализ результатов исследования валового содержания тяжелых металлов в почве Шахтерского района указывает на полиэлементное загрязнение пахотного слоя почвы, превышающее фон в ~ 1,5 раза (табл. 2). Причем валовое содержание ртути и свинца превышает фоновое содержание во всех пробах. Превышение фона по цинку, меди и кадмию отмечено в 90 %, 34 % и 49 % проб, соответственно.

Таблица 2. Содержание полютантов в почве и воде

Образец	Колич. исслед. образцов	Содержание, мг/кг						
		Hg	Cu	Zn	Pb	Cd	F-ион	NO_3-ион
Валовое содержание	24	0,09(0,04-0,18)	15,5(14,2-21,6)	61,4(50-75)	15,8(11,0-19,1)	0,44(0.20-0,81)	не опр.	не опр.
Вода из колодцев, скважин, родников	17	0,003(0,001 - 0,004)	0,36(0,14-0,65)	0,40(0,24-0,92)	0,02(0,02-0,03)	не опред.	0,20(0,09-0,50)	142(28,2-412)

В пробах воды из водозаборов (колодцев, скважин, родников) превышение требований ГОСТа-2874 по изученным тяжелым металлам не обнаружено за исключением нитратов. Однако, в соответствии с оценкой качества этой воды как оросительной (РНД 33-5,5-02) по ряду элементов (медь, цинк, ртуть)

ее можно отнести к классу «Ограниченно пригодной», что предусматривает постоянный экологический контроль. Содержание нитратов превышает допустимое содержание в питьевой воде в 3,2-9,2 раза.

Значительный уровень загрязнения пахотного слоя почвы и водных источников цинком, свинцом, кадмием, ртутью, нитратами приводит к накоплению токсикантов в сельхозпродукции. Проведенные исследования показали, что овощи и фрукты интенсивно накапливали свинец (табл. 3). Из 92 изученных образцов 32 (35 %) было с превышением ПДК по свинцу. Содержание свинца в яблоках, луке не превышало ПДК. Концентрация свинца в свекле, картофеле, помидорах превышала допустимый уровень в 1,5-5,2 раза. Причем, при увеличении массовой концентрации свинца наблюдается уменьшение массовой концентрации железа, особенно в помидорах (табл. 3). Высокое содержание свинца в плодоовощной продукции, по-видимому, обусловлено техногенными выбросами. Превышение допустимых уровней ртути, меди и цинка в плодоовощной продукции не выявлено. Наибольшее содержание меди отмечается в сливах – среднее значение составляет 4,02 мг/кг, цинка – в свекле и картофеле.

Представляло интерес наряду с тяжелыми металлами определить также в плодоовощной продукции содержание фторидов и стронция, которые относятся, соответственно, к элементам первого и третьего класса опасности. Значительные количества стронция накапливают картофель, лук, свекла, наименьшее содержание стронция – в яблоках. Максимальное содержание фторидов наблюдается в свекле – 1,15 мг/кг.

Требования к качеству пищевых продуктов устанавливают норму нитратов, что связано с вредным влиянием избыточного нитратного азота на организм человека. В свекле, картофеле, помидорах, луке и сливах уровень загрязнения нитратами значительный (табл. 4). Больше всего нитратов накапливает свекла – в среднем 2399 мг/кг, в отдельных пробах превышение ПДК составляло 3, 4 раза. Среднее содержание нитратов в картофеле и луке не превышает ПДК, однако, 27 % исследованных образцов картофеля превышает ПДК в 7 раз, что по-видимому, связано с бесконтрольным применением агрохимикатов и загущением посевов.

Таблица 3. *Содержание микроэлементов в плодоовощной продукции*

Культура	Содержание компонентов, мг/кг сырой массы *						
	Ртуть (II)	Медь (II)	Цинк (II)	Свинец (II)	Стронций (II)	Железо (общ.)	Фториды
	ПДК=0,02	ПДК=5	ПДК=10	ПДК=0,5 ПДК фрукты =0,4			
Свекла	0,011(0,005-0,020)	0,60(0,19-1,21)	4,18(1,35-7,24)	0,48(0,25-0,75)	14,1(8,39-19,4)	15,5(5,67-42,7)	0,23(0,12-1,15)
Картофель	0,013(0,009-0,022)	0,51(0,94-0.14)	4,26(1,85-7.58)	0,49(0,35-0,90)	12,5(7,47-24,5)	19,7(3,91-33,6)	0,42(0,06-0,99)
Помидоры	0,016(0,011-0,020)	0,52(0,28-1,30)	2,52(1,82-4,02)	0,81(0,26-2.62)	4,48(1,08-7,35)	5,86(1,08-19,6)	не опред.
Лук	0.009(0,007-0,015)	0,42(0,27-0,59)	0,90(0,18-1,53)	0,44(0,41-0.50)	13.6(6,51-16,3)	52,9(45,4-66,1)	не опред.
Сливы	0,014(0,012-0,020)	4,02(3,76-4,20)	2,92(1,92-3,46)	0,39(0,23-0,52)	4.62(1,18-7.99)	16.9(11,2-19,9)	не опред.
Яблоки	0,016(0,009-0,019)	0,35(0,17-0,66)	2,09(0,72-3,23)	0,31(0,16-0,38)	3,09(1,43-4,84)	19,1(16,3-23,5)	0,015(0,01-0,04)

* - перед скобками приведено значение среднего арифметического, в скобках – интервал изменения массовых концентраций

Таблица 4. Содержание нитратов в плодоовощной продукции

Культура	Количество исследованных образцов, шт	Содержание нитратов, мг/кг сырой массы		Кол-во образцов с превышением ПДК, % от исследованных
		интервал концентрации	среднее	
Свекла	49	49,8-7513	2399	51
Картофель	105	6 – 840	101	27
Помидоры	43	24 – 173	55,5	9
Лук	9	61 – 133	99,4	30
Сливы	37	20 – 75	42,4	11
Яблоки	58	15 – 51	32,4	нет

Таким образом, пахотный слой почвы в угледобывающем регионе загрязнен преимущественно свинцом, ртутью, цинком, в меньшей степени кадмием и медью. Содержание нитратов в воде превышает ПДК в 3,2-9,2 раза. Наиболее распространенном токсикантом в растительной продукции является свинец, содер-

жание которого в свекле, картофеле, помидорах превышало допустимый уровень в 1,5-5,2 раза. При увеличении содержания свинца наблюдается уменьшение содержания железа. Отмечено превышение ПДК по нитратам в овощах в 1,2-5,3 раза. Для обеспечения производства продуктов питания в соответствии с требованиями экологической безопасности необходим систематический контроль их качества, а также соответствующие контрмеры, направленные на снижение уровня токсикантов в растениях.

РЕЗЮМЕ

Визначені основні залежності стану агроландшафтів від дії аеральних емісій з терриконів. Кислі компоненти і рухомі форми важких металів викидів обумовлюють деградацію ґрунтів по агрофізичним і агрохімічним показникам. В цих умовах в овочевій продукції накопичуються важкі метали, фториди, стронцій та ін.

SUMMARY

Definite basic to dependence of the state of agro landscapes on action of aeralnih emissions from waste banks. Sour components and mobile forms of heavy metals of the troop landing stipulate degradation of soils on to the indexes agrofizichnim and agricultural chemistry. In these terms heavy metals accumulate in vegetable products, Floridi, strontium and insh.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Земля тривоги нашої / Под ред. С.В.Третьякова. – Донецьк: Новий мир. -- 2003. – 158 с.
2. Временное методическое руководство по разработке мероприятий по охране воздушного бассейна на предприятиях угольной промышленности. – Москва, 1979. – 203 с.
3. Мартынюк А.А., Янковская Э.В., Щулюк В.А. и др. Экологические и технические аспекты обращения с отходами в теплоэнергетике Сб. науч.статей: Проблемы сбора, переработки и утилизации отходов. – Одесса, ОЦНТЭИ, 2001. – С. 225-232.
4. Обухов А.И., Тихонова И.О. Атомно-абсорбционный анализ в почвенно-биологических исследованиях. – М.: Изд-во МГУ, 1991. – 184 с.
5. ГОСТ 24481-80. Вода питьевая. Отбор проб. – Изд-во стандартов. 1981. – 5 с.
6. ГОСТ 17.4.4.02.84. Охрана природы. Почвы. Методы отбора и подготовки проб для химического, бактериологического и гельминтологического анализа. – Изд-во стандартов, 1985. – 6 с.
7. ГОСТ 26929-86. Сырье и продукты пищевые. Подготовка проб. Минерализация для определения токсичных элементов. – Изд-во стандартов, 1986. – 11 с.
8. ISO 5666/1-83. Качество воды. Анализ общей ртути методом беспламенной атомно-абсорбционной спектрометрии.
9. ГОСТ 4386-89. Вода питьевая. Методы определения массовой концентрации фторидов. – Изд-во стандартов, 1990. – 13 с.
10. Хаваш Е. Ионно- и молекулярноселективные электроды в биологических системах. – М: «Мир», 1988. – 222 с.

Надійшла до редакції 03.10.2007 р.

УДК 631.95:632.15

ФОРМИ ІСНУВАННЯ І ПОВЕДІНКА ЕКОТОКСИКАНТІВ В АГРОЕКОСИСТЕМАХ

Л.І.Коноваленко,
Донецький інститут агропромислового виробництва УААН

Епіцентром деградації агроландшафтів в південно-східному промисловому регіоні виступають підприємства і промислові агломерації. За рахунок транспорту екотоксикантів з їх території на сільгоспугіддя спостерігається накопичення характерних для регіону ксенобіотиків в ґрунтах, поверхневих і підземних водах, рослинах і атмосферних опадах. Одночасно, при застосуванні агрохімікатів в складових агроекосистем також відбувається накопичення значної кількості токсичних речовин. При цьому можливе [illegible] км від джерела забруднення по «розі» вітрів. Шкодочинність екотоксикантів для агробіоценозів в значній мірі визначається формами існування ксенобіотиків в ресурсних потоках, що супроводжують промислове виробництво, а також буферністю ґрунтів. Накопичення цих речовин в сільгосппродукції погіршує її якість і зменшує конкурентоспроможність.

Для умов південно-східного промислового регіону актуальне визначення потоків основних ксенобіотиків в агроландшафти, а також особливостей форм їх існування з метою оцінки агроекологічної ситуації в регіоні.

Вміст важких металів в ґрунті і рослинах визначали методом атомно-абсорбіційної спектроскопії на КАС-120.1 з електротермічною атомізацією, джерело випромінювання – лампи ЛТ-2. Для визначення рухомих форм важких металів готували екстракт з ґрунту амонійно-ацетатним буферним розчином з pH 4,8 в співвідношенні 1:5 [1]. Важкі метали в рослинних зразках визначали в їх зольних розчинах після спалювання рослин методом сухої мінералізації [2]. Вміст селену і миш'яку визначали на приборі «Spectroskan» рентгенофлуоресцептним методом [3]. Зразки рослин і ґрунту (шар 0-10 см) відбирали і підготовляли за загальноприйнятою методикою [4]. Вміст фторидів визначали потенціометричним методом з F-селективним електродом «Элис-131F» [5]. Зони розсіювання викидів в атмосферу розраховували відповідно до програми «Пленер».

Одним з головних постачальників екотоксикантів в агроландшафти є промисловий пил. Розраховані зони розсіювання пилу в приземному прошарку від гіпотетичного джерела наведені в таблиці 1.

Таблиця 1. Зони розсіювання пилу

Відстань від джерела викидів, км	Зона ГДК по пилу
1	2-4
2	1-3
5	0,7-1,0
10	0,3-0,6
20	< 0,01

Як результат розсіювання над сільгоспугіддями газово-пилових викидів, що містять токсичні елементи (таблиця 2) визначається підвищений вміст важких металів в ґрунтах.

Таблиця 2. Масова концентрація мікрокомпонентів в промисловому пилу

Компонент	Масова концентрація, мг/кг		Регіональний фон в ґрунтах, мг/кг [6]
	вуглепородний	металургійний	
Фтор	182-340	[illegible]	[illegible]
Марганець	250-430	[illegible]	[illegible]
Селен	2,50-4,82	0,05-0,25	3
Стронцій	280-570	50-75	300
Цинк	28-40	70-93	55
Свинець	13-38	45-61	12
Кадмій	3,7-5,1	0,3-1,5	0,5
Мідь	21-33	60-80	20
Ртуть	0,20-0,67	~ 0,01	0,03

© Коноваленко Л.І.

Кислі компоненти викидів в атмосферу (SO_2, NO_x та інш.), а також окисно-відновні реакції в аерозолях сприяють утворенню рухомих форм важких металів. Органічні сполуки, альдегіди, оцтова кислота, фенол та ін., а також атмосферна волога ускладнюють ці процеси. В зоні до 10 км від джерела викидів спостерігається диференціація вмісту валових і рухомих форм важких металів в залежності від типу виробництва (таблиця 3). На більших відстанях, а також концентрація в заповідниках екотоксикантів практично не залежить від складу викидів. При цьому вміст рухомих форм важких металів суттєво не змінюється, але концентрація валовий форм в грунтах при наближенні до промислових агломерацій збільшується.

Таблиця 3. Вміст важких металів в грунтах по «розі вітрів»

Відстань від джерела викидів	Вміст важких металів в грунтах, мг/кг			
	Cu	Pb	Zn	Cd
Вплив металургійного виробництва (ВАТ «ММК ім. Іллі-ча»				
до 10	20/2,0	21/1,1	70/6,0	0,90/0,15
~ 20	18/1,5	15/0,8	61/5,8	0,55/0,09
~ 30	18/1,5	8/0,8	55/5,2	0,50/0,07
Вплив енергетики (Старобешівська ТЕС)				
до 10	16/1,9	18/0,9	64/6,1	0,90/0,12
~ 20	12/1,8	16/0,8	58/5,6	0,70/0,09
~ 30	17/1,9	14/0,7	55/5,6	0,80/0,09

Це дає підставу для визначення валового вмісту важких металів в грунтах як характеристики інтенсивності атропо-техногенного навантаження і дозволяє запропонувати механізм взаємодії компонентів в грунтових розчинах і грунтово-поглинаючому комплексі (ГПК). В загальному вигляді ГПК можна вважати специфічних іонним насосом, який в сукупності з кореневими мембранами рослин обумовлює дифузійні, адсорбційні явища концентраціонної поляризації в системі «рухомі форми важких металів» – «валові форми важких металів» – ГПК – рослина. Транспорт екотоксикантів в сільгоспкультури відбувається також безпосередньо з аеральних емісій. Так вміст свинцю в зерні ячменя в зоні ГДК ~ 1 по пилу становив 0,95 мг/кг. При практично однаковому вмісті рухомих форм свинцю в грунті в вегетаційних дослідах вміст свинцю в зерні був в 2,5-3 рази нижчим.

Рухомість екотоксикантів перебуває у тісній залежності від їх хімічних особливостей. Буферний потенціал чорноземів, їх толерантність по відношенню до досліджених важких металів пов'язані з комплексоутворенням з органічною складовою (вміст гумусу ~5,8 %) і реакцією грунтового середовища близькою до нейтральної (pH>6,8).

В той же час по відношенню до рухомих форм аніоногенних екотоксикантів (F, Se, As), що належать до 1 класу небезпеки чорноземи мають низьку спорідненість.

Наприклад, фториди надходять до агросфери за рахунок техногенного навантаження і разом з фосфорними добривами, які містять 0,5-4 % фтору. Різниця в формах існування фторидів в грунтах зумовлює різні концентрації при екстракції їх водними розчинами кислот і лугів (таблиця 4).

Таблиця 4. Вміст фторидів в грунтах

Проба грунту	Концентрація, мг/кг		
	екстрагент		
	H_2O	0,1 HCL	0,1 NaOH
Контроль (добрива не вносились 10 років)	5,8	2,6	11,5
Соняшник (P_{45})	9,1	4,3	17,7
Кукурудза (P_{20})	8,2	3,1	16,8
Відстань до відвалу, км			
0,5	23,9	11,0	47,2
5,0	12,2	6,1	24,5
Природні родовища крейди, відстань, км			
0,5	21,8	26,9	41,7
5,0	11,4	18,8	36,6

Біодоступність рухомих форм фторидів приводить до накопичення його в рослинах (таблиця 5)

Таблиця 5. Вміст фторидів в рослинах в зоні дії аеральних емісій, горящого відвала

Об'єкт	Відстань від джерела, км	Масова концентрація F, мг/кг (сух.реч)
По «розі вітрів»		
Зерно	0,8-1,5	3,3-4,6
Солома	0,8-1,5	1,8-2,7
Зерно	~ 5	0,9-1,6
Солома	5	0,9-1,4
Суміш трав, надземна частина	На відвалі безпосередньо	7,9-14,5

З аналізу експериментальних даних по різним формам фторидів, а також вищенаведених результатів можливе припущення, що є залежність між транслокацією в рослини і їх вмістом в грунтах.

Таким чином, методами хімічного аналізу показано, що надходження важких металів в рослини обумовлено їх транспортом в системах атмосфера-грунт-рослина і атмосфера-рослина. Валовий вміст важких металів в грунтах характеризує інтенсивність антропо-техногенного навантаження на агробіогеоценози. Чорнозем має високу ступінь толерантності до катіоногенних екотоксикантів, в той же час його буферність до аніоногенних ксенобіотиків низька.

РЕЗЮМЕ

В условиях антропо-техногенной нагрузки на сельхозугодья происходит загрязнение почв, растений и продукции комплексом экотоксикантов, рассеивающихся в составе газо-пылевых выбросов в приземном слое атмосферы. Накопление ксенобиотиков в растениях обусловлено поступлением их подвижных форм из почв и непосредственно аэральных эмиссий. Степень биодоступности экотоксикантов из черноземов определяется разным сродством с органической составляющей почв для катионогенных и анионогенных элементов.

SUMMARY

In the conditions of antropo-tehnogennoy load on arable land there is contamination of soils, plants and products by the complex of ecotoxic elements, dispersing in composition gazo-dust troop landing in the ground layer of atmosphere. Accumulation of ksenobiotikov in the plants is conditioned by the receipt of their mobile forms from soils and directly aeralnih emissions. The degree of bio-avalability of ekotoksikantov from black earths is determined by a different affinity with the organic constituent of soils for kationogennih and anionogennih elements.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Обухов А.И., Тихонова И.О.: Атомно-абсорбционный анализ в почвенно-биологических исследованиях. – М.: Изд. МГУ, 1991. 184 с.
2. ГОСТ 26929-86. Сырье и продукты пищевые. Подготовка проб. Минерализация для определения токсичных элементов. – М.: Изд. стандартов, 1986. – 11 с.
3. Методы биохимического исследования растений / А.И.Ермаков, В.В.Арасимович, М.И.Смиронова-Иконникова и др. – Л.: Агропромиздат, 1987. – 430 с.
4. Методические указания по проведению энергодисперсионного рентгенофлуоресцентного анализа растительных материалов / Под. ред. Ю.И.Логинова. – М.: Колос, 1983, – 47 с.
5. Хаваши Е. Ионо-и молекулярно-селективные электроды в биологических системах. – М.: Изд. Мир, 1988. – С.142-143.
6. Дудик А.М. Временные методические рекомендации по геолого-экологическим работам в пределах горнопромышленных районов Украины. – Донецк, 1992. – 105 с.

Надійшла до редакції 08.10.2007 р.

УДК 662.32

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ОПАСНЫХ ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ПРОЦЕССОВ В ТЕХНОСФЕРЕ УКРАИНЫ

Г.В.Аверин, В.М.Москалец,
Донецкий национальный технический университет

Вступление

В последнее время в нашей стране уделяется большое внимание техногенной безопасности. В 2001г. был принят Закон Украины «Об объектах повышенной опасности» [1], позже – ряд других документов [2, 3, 4] в рамках Директивы Совета ЕС 96/82/ЕС [5], направленных на защиту жизни и здоровья

Основной составляющей техногенной безопасности является состояние безопасной эксплуатации объектов повышенной опасности (ОПО) – объектов, на которых используются, изготовляются, хранятся, перерабатываются или транспортируются опасные вещества, в т.ч. пожаровзрывоопасные и токсичные, в количествах, превышающих нормативно установленные массы. К ОПО относят также объекты, являющиеся угрозой возникновения чрезвычайных ситуаций (ЧС) техногенного и природного характера, в т. ч. гидротехнические сооружения, хвостохранилища, шламонакопители, полигоны токсичных отходов и т.д.

Для техногенной безопасности актуально изучение опасных процессов на ОПО, аварии на которых могут привести к летальным последствиям для персонала предприятий, опасным воздействиям для населения и окружающей природной среды.

Со времени вступления в силу Закона Украины «Об объектах повышенной опасности» Госгорпромнадзор (ГГПН) и МЧС Украины ведут учет ОПО и контролируют мероприятия по их безопасной эксплуатации. По данным ГГПН и МЧС количество ОПО в Украине на конец 2006г. составило 5777 единиц, данные объекты принадлежат примерно 2500 субъектам хозяйствования, ведущим деятельность в 10 основных отраслях национальной экономики.

Распределение риска возникновения смертельных несчастных случаев по этим отраслям (по состоянию на 2005г.) приведено в таблице 1 [6].

Таблица 1. Распределение риска возникновения смертельных несчастных случаев по отраслям экономики Украины

Отрасль экономики	Количество работников, среди которых возникает 1 смертельный случай в год	Вероятность смертельного случая
Металлургическая	6437	$1{,}6\cdot10^{-4}$
Химическая	3364	$3{,}0\cdot10^{-4}$
Угольная	1139	$8{,}8\cdot10^{-4}$
Энергетическая	4387	$2{,}3\cdot10^{-4}$
Строительная	5303	$1{,}8\cdot10^{-4}$
Машиностроительная	14013	$7{,}1\cdot10^{-5}$
Транспортная	5945	$1{,}7\cdot10^{-4}$
Связь	63450	$1{,}6\cdot10^{-5}$
Жилищно-коммунальное хозяйство	12274	$8{,}1\cdot10^{-5}$
Аграрно-промышленный комплекс	5199	$1{,}9\cdot10^{-4}$

При анализе риска возникновения смертельных случаев с учетом рекомендуемых приемлемых норм рисков, предложенных Национальным научно-исследовательским институтом охраны труда (ННИИОТ) [6], можно сделать вывод о том, что только угольная отрасль работает в границах недопустимого риска ($8{,}8\cdot10^{-4}$ при неприемлемом риске $5{,}001\cdot10^{-4}$). Величины приемлемых рисков в Украине в настоящее время законодательно не установлены.

По данным Международной организации труда [7] в 2001 г. опасность реализовалась в смертельных травм на производстве, риск возникновения которых составлял: в Европе – $8{,}6\cdot10^{-5}$ (1 случай на 11636 работающих); в Америке – $1{,}4\cdot10^{-4}$ (1 случай на 6974 работающих); в Азии – $1{,}5\cdot10^{-4}$ (1 случай на 6746 работающих); в Африке – $1{,}8\cdot10^{-3}$ (1 случай на 547 работающих); в бывших социалистических странах Европы – $1{,}3\cdot10^{-4}$ (1 случай на 7567 работающих); в Индии – $1{,}1\cdot10^{-4}$ (1 случай на 8709 работающих); в Китае – $1{,}05\cdot10^{-4}$ (1 случай на 9506 работающих); в мире в целом – $1{,}6\cdot10^{-4}$ (1 случай на 6102 работающих). В 2001 г. в Украине опасность реализовалась в смертельные случаи с частотой $9{,}6\cdot10^{-5}$ (1 случай на 10425 работающих).

Динамика смертельного производственного травматизма и техногенных ЧС в Украине представлена на рис. 1. Приведенные данные отражают тенденцию снижения смертельного производственного травматизма и техногенных ЧС.

© Аверин Г.В., Москалец В.М.

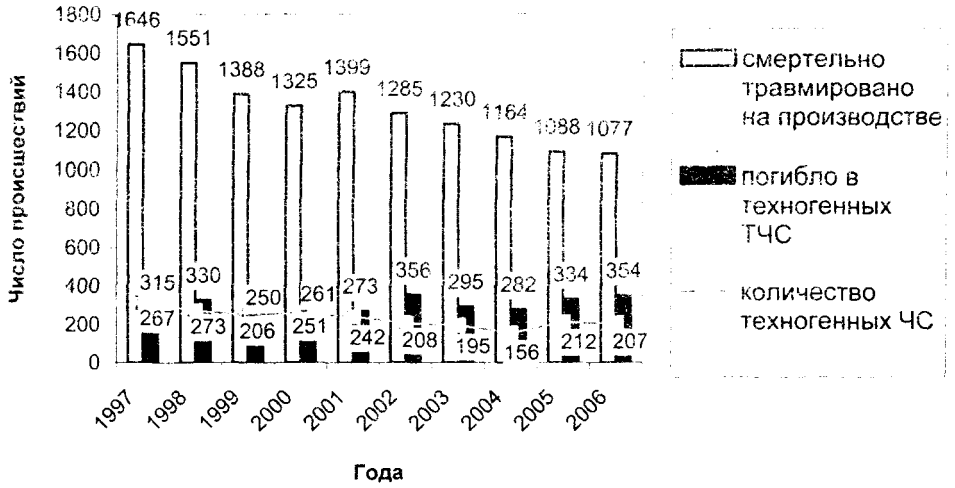


Рис. 1. Динамика смертельного производственного травматизма и техногенных ЧС в Украине

Основными причинами несчастных случаев являются нарушения потерпевшими требований безопасности во время эксплуатации оборудования, механизмов и транспортных средств, неисполнение служебных обязанностей и требований инструкций по охране труда, неудовлетворительная организация выполнения работ со стороны должностных лиц предприятий, конструктивные недостатки, неудовлетворительное состояние средств производства и другие причины.

В области техногенной безопасности характерной особенностью отечественного законодательства является то, что ведется государственный статистический учет только аварий I и II категории [8], в результате которых гибнет от 5 человек и травмируется от 4 человек и выше, а также групповых несчастных случаев (далее ГНС), которые случаются с двумя и более трудящимися.

Согласно требованиям ст. 10 Закона Украины «Об объектах повышенной опасности» [1] субъект хозяйственной деятельности разрабатывает декларацию безопасности для ОПО. По данным ГГПН и МЧС в Украине на конец 2006 г. зарегистрировано 3221 декларация безопасности ОПО.

При составлении деклараций безопасности ОПО согласно требованиям НПАОП 0.00-6.22-02 [4] необходимо представлять раздел «Перечень аварий и аварийных ситуаций, которые возникали на ОПО». Однако при соответствующих запросах предприятия обычно однозначно отвечают, что аварий I и II категории на объекте не было. И только при более тщательном анализе выясняется, что когда-то произошло, например, опасное событие или возникла опасная ситуация.

Таким образом, представляется крайне сложным собрать данные об аварийности на предприятиях Украины, т.к. эта информация для предприятий носит конфиденциальный характер. Приходится ограничиваться статистическими данными по возникновению ГНС и данными МЧС о техногенных ЧС, статистическая отчетность по которым, в принципе, удовлетворяет требованиям Директивы Севезо II [5]. Согласно директиве при возникновении крупной аварии эксплуатирующая организация обязана безотлагательно уведомить об аварии компетентные органы власти. Это требование должно распространяться и на аварийные ситуации, которые представляют интерес для предотвращения крупных аварий, и уж тем более на происшедшие аварии.

Анализ динамики возникновения опасных событий

Для изучения опасностей производств в техносфере Украины были использованы методы системного анализа, направленные на изучение динамики возникновения опасных событий, в частности техногенных ЧС, ГНС и т.д.

Для этой цели был проведен сбор статистических данных МЧС [9] и ГГПН, приведенных в журнале «Охрана труда» в рубрике «Горькая статистика». Данные собирались помесячно за 1998÷2007г.г. По МЧС проанализированы данные по техногенным ЧС: количество ЧС, число погибших и пострадавших. По ГГПН были проанализированы данные по общему количеству погибших на производстве и по групповым несчастным случаям: количество случаев, число погибших и травмированных в них. Вид представленных данных – временные ряды опасных событий, динамика данных представлена на рис.2.

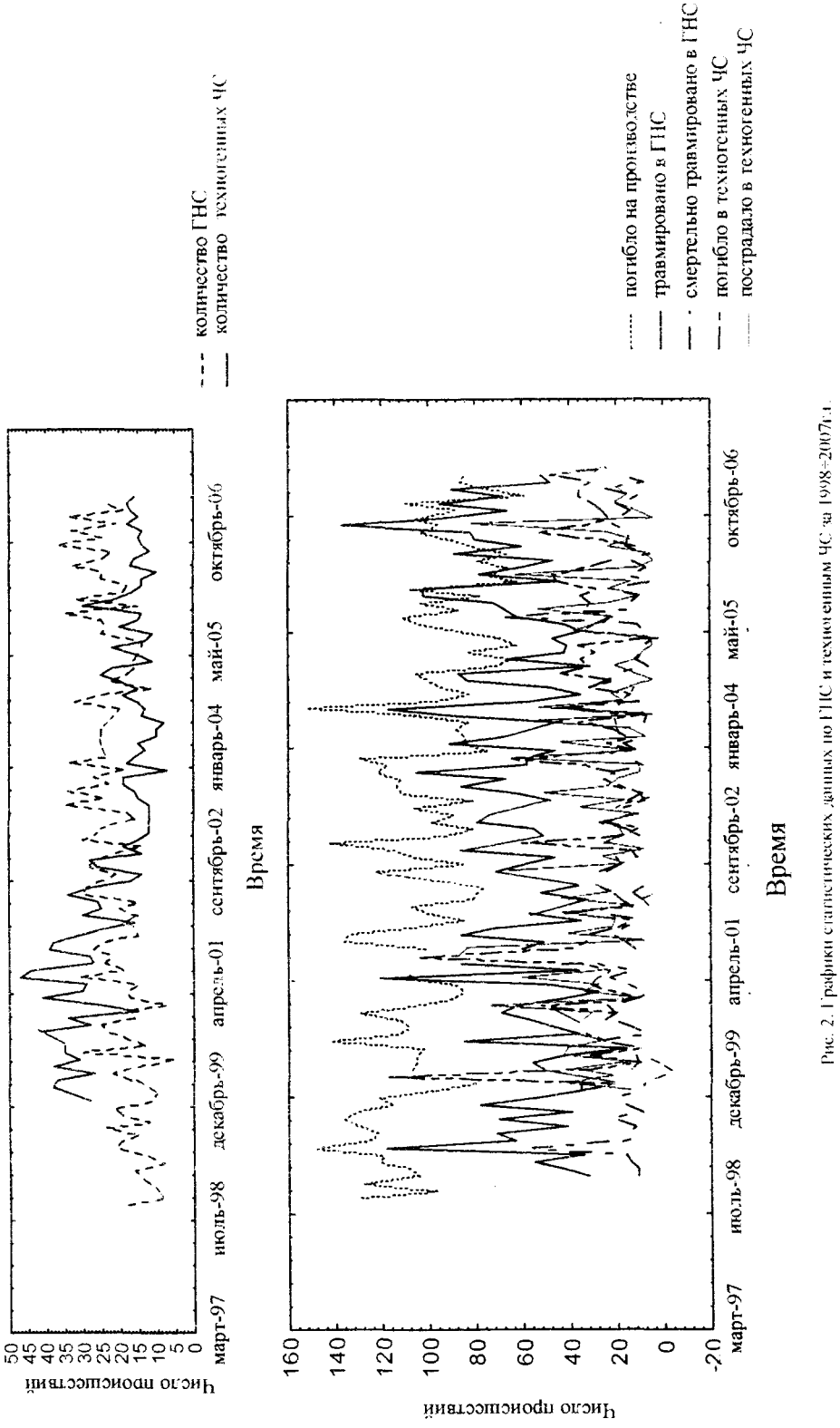


Рис. 2. Графики статистических данных по ГНС и техногенным ЧС за 1998–2007 гг.

При системном анализе опасных процессов проводились следующие исследования: изучение видов вероятностных распределений по каждой группе опасных событий, поиск системных закономерностей, основанных на изучении вероятностных распределений, анализ динамики изменения опасных процессов во времени, установление временных закономерностей возникновения опасных событий. Для этой цели использовались методы поиска видов распределений и статистического анализа временных рядов, в частности, метод авторегрессии и проинтегрированного скользящего среднего (АРПСС).

В результате анализа установлено, что все распределения событий подчиняются логнормальному распределению, а события, отражающие аварийность на предприятиях (количество ГНС и количество техногенных ЧС) имеют близкие значения среднего и дисперсии (см. рис. 3 и таблицу 2).

Таблица 2. Параметры распределений событий

Событие	Среднее	Среднеквадратическое отклонение
1. Смертельный травматизм на производстве	4.6105	0.0560
2. Количество ГНС	2.9840	0.1411
3. Травмировано в ГНС	4.0847	0.1690
4. Смертельно травмировано в ГНС	2.6427	0.3683
5. Количество техногенных ЧС	2.9705	0.1891
6. Погибло в техногенных ЧС	3.1596	0.2879
7. Пострадало в техногенных ЧС	3.1054	0.6677

В результате анализа временных рядов были установлены системные закономерности, характеризующие опасные процессы и заключающиеся в том, что динамика процессов описывается однотипными моделями АРПСС.

Метод АРПСС имеет широкое распространение при моделировании экологических и социально-экономических процессов.

Большинство временных рядов содержат последовательно зависящие друг от друга элементы. Уравнение авторегрессии такой зависимости имеет вид [10]:

$$Y_t = a_0 + a_1 \cdot Y_{t-1} + a_2 \cdot Y_{t-2} + a_3 \cdot Y_{t-3} + ... + \varepsilon_t ,$$

где a_0 – свободный член; $a_1, a_2, a_3 ... (-1 < a_i < 1)$ – параметры авторегрессии. Для данной модели каждое наблюдение есть сумма случайной компоненты (случайное воздействие ε_t) и линейной комбинации предыдущих наблюдений.

В процессе скользящего среднего, в отличие от процесса авторегрессии, каждый элемент ряда подвержен суммарному воздействию предыдущих ошибок. В общем виде соответствующее уравнение выглядит следующим образом [10]:

$$Y_t = b_0 + b_1 \cdot \varepsilon_{t-1} + b_2 \cdot \varepsilon_{t-2} + b_3 \cdot \varepsilon_{t-3} + ... + \varepsilon_t$$

Текущее наблюдение ряда представляет собой сумму случайного воздействия ε_t в данный момент времени и линейной комбинации случайных воздействий в предыдущие моменты времени.

Общая модель АРПСС, предложенная Боксом и Дженкинсом [10], может включать как параметры авторегрессии, так и параметры скользящего среднего. Существует три типа параметров модели: параметры авторегрессии (p), порядок разности (d), параметры скользящего среднего (q). В общем виде модель может иметь следующий вид:

$$Y_t = a_0 + a_1 \cdot Y_{t-1} + a_2 \cdot Y_{t-2} + a_3 \cdot Y_{t-3} + ... + b_0 + b_1 \cdot \varepsilon_{t-1} + b_2 \cdot \varepsilon_{t-2} + b_3 \cdot \varepsilon_{t-3} + ... + \varepsilon_t$$

Установленная модель для описания динамики шести различных видов опасных событий (события 2÷7 таблицы 2) имеет вид:

$$\Delta Y_t = q_1 \cdot Y_{t-1} + \varepsilon_t ,$$

где $\Delta Y_t = Y_t - Y_{t-1}$ – первая разность

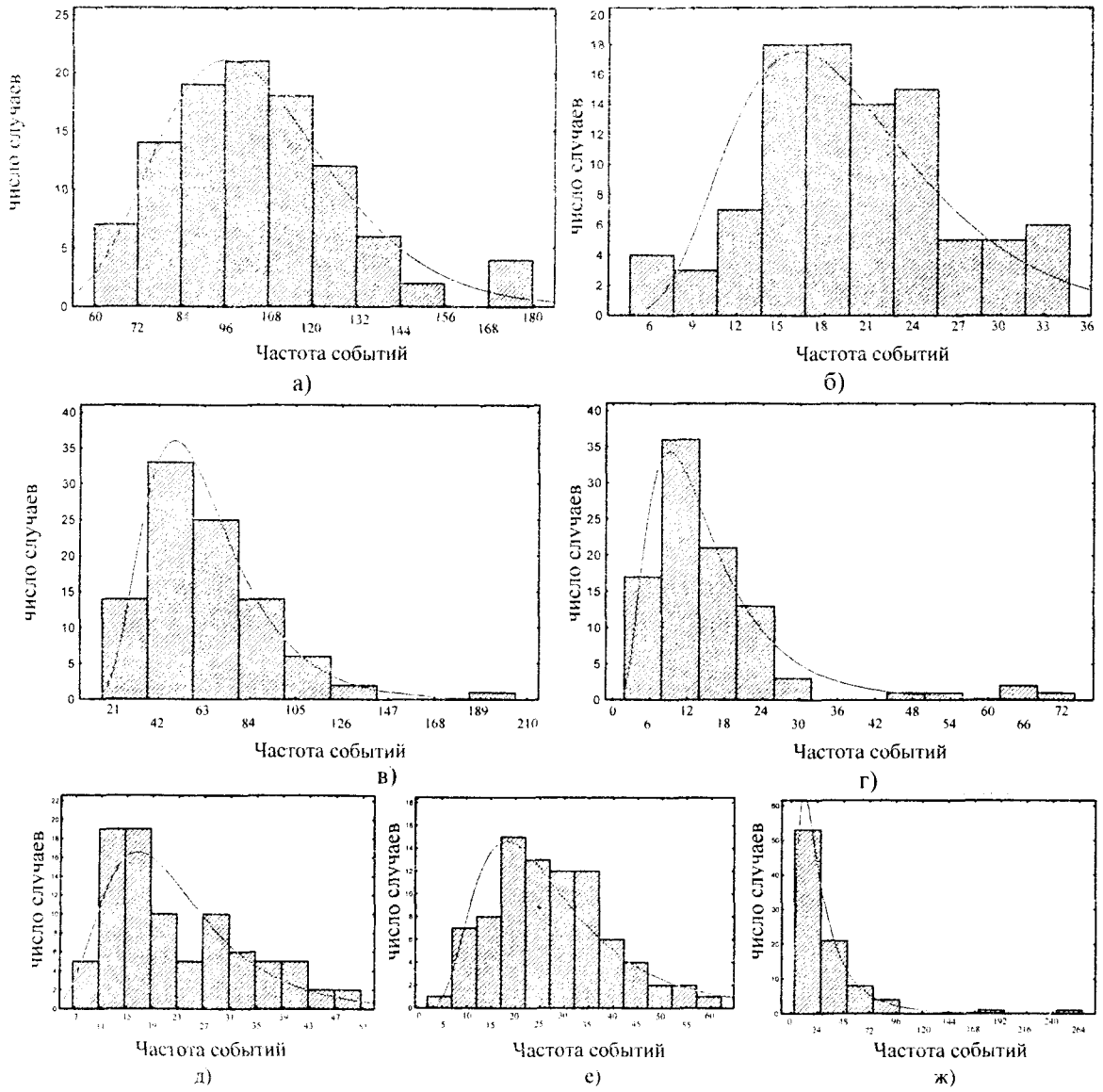


Рис. 3. Анализ вероятностных распределений опасных событий
а) смертельный травматизм на производстве; б) количество ГНС; в) травмировано в ГНС; г) смертельно травмировано в ГНС; д) количество техногенных ЧС; е) погибло в техногенных ЧС; ж) пострадало в техногенных ЧС

В процессе исследования опасных производственных процессов установлены следующие параметры моделей АРПСС (таблица 3).

Таблица 3. Параметры АРПСС

Событие согласно таблице 2	Вид модели АРПСС	q	Характеристики остатков			
			среднее	дисперсия	min	max
2. Количество ГНС	(0,1,1)	0,87355	0.593404	6.317327	-13.6298	15.22997
3. Травмировано в ГНС		0,87151	3.233026	23.16299	-37.9534	82.09390
4. Смертельно травмировано в ГНС		0,96146	1.254973	9.968090	-11.5567	55.41811
5. Количество техногенных ЧС		0,71031	-0.458537	6.227932	-19.3628	16.41449
6. Погибло в техногенных ЧС		0,94728	-1.25755	17.63859	-29.0721	81.79084
7. Пострадало в техногенных ЧС		0,87463	0.795269	19.84525	-39.6185	61.50289

В процессе исследования опасных событий, связанных со смертельным травматизмом на производстве, установлено, что их динамика описывается моделью вида АРПСС $(0,1,1)x(1,0,1)_6$ с тремя параметрами: φ=0,80809, P=-0,9797, Q=-0,7224. Второй и третий параметры (сезонные) отражают цикличность с периодом 6 месяцев. Анализ причин сезонности смертельного производственного травматизма является отдельной темой исследований, и в данной статье не рассматривается. Возможно, причины данного явления не имеют производственного характера, а связаны с социальными факторами.

Выводы

Таким образом, в процессе анализа установлены закономерности опасных производственных процессов в техносфере, заключающиеся в том, что соответствующие опасные события имеют один и тот же вид вероятностного распределения, и их динамика описывается идентичными моделями АРПСС.

События, отражающие возникновение ГНС и техногенных ЧС, имеют сходные виды логнормального распределения, что позволяет использовать их параметры для анализа риска возникновения аварий на предприятиях.

Установленные закономерности позволяют сделать вывод о возможности прогнозирования краткосрочных тенденций таких сложных вероятностных процессов, как смертельный травматизм и аварийность на производстве. На эту возможность, кстати, указывают и авторы статьи [11]. Однако для построения достоверных моделей считаем, что необходимо накопление значительно большего количества систематизированных статистических данных по всем возможным видам опасных ситуаций на производстве.

РЕЗЮМЕ

Розглянуті тенденції змін аварійності, техногенних надзвичайних ситуацій і травматизму в Україні. Установлені закономірності небезпечних виробничих процесів у техносфері України.

SUMMARY

The tendencies of changes of the fault rates, the technogenic emergencies and the injuries in Ukraine were considered. The mechanisms of the dangerous industrial process in the technosphere of Ukraine were determined.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Закон Украины «Об объектах повышенной опасности» от 18.01.2001 №2245-III.
2. НПАОП 0.00-4.33-99 «Положение по разработке планов локализации и ликвидации аварийных ситуаций и аварий».
3. НПАОП 0.00-3.08-02 «Нормативы пороговых масс опасных веществ для идентификации объектов повышенной опасности».
4. НПАОП 0.00-6.22-02 «Порядок декларирования безопасности объектов повышенной опасности».
5. Директива Совета ЕС 96/82/ЕС. О сдерживании опасностей крупных аварий, связанных с опасными веществами/Совет Европейского союза: Женева, 1996. – 22 с.
6. Система попередження нещасних випадків на виробництві та професійних захворювань. Методичний посібник. 2005 р.
7. Лесенко Г. Професійний ризик виробництва та виробничий травматизм // Охорона праці. – 2003. – №4. – С. 36-38.
8. НПАОП 0.00-6.02-04 «Деякі питання розслідування та ведення обліку нещасних випадків, професійних захворювань і аварій на виробництві».
9. http://mns.gov.ua/monthly/
10. Боровиков В.П. Прогнозирование в системе STATISTICA в среде Windows: Основы теории и интенсивная практика на компьютере: Учеб. пособие / В.П. Боровиков, Г.И. Ивченко. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Финансы и статистика, 2006. – 368 с: ил.
11. Качинський А.Б., Лаврентьєв С.А., Сонкіна Г.Л., Хміль Г.А. Аналіз надзвичайних ситуацій в Україні та їх короткостроковий прогноз // Екологія і ресурси Укр. Ін-т дослідж. навколиш. середовища і ресурсів. – УІНСіР НРОУ. – 2006. – С. 41-57.

Надійшла до редакції 27.09.2007 р.

СИСТЕМИ УПРАВЛІННЯ

УДК 004.45 + 004.77

ПРАКТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ЗАЩИТЫ КОРПОРАТИВНОЙ ПОЧТОВОЙ СИСТЕМЫ ОТ ПОТОКА СПАМА

А.В.Товстолис

В работе [1] был проведен анализ угроз, вызванных бурным развитием спамерской деятельности в настоящее время, и приведены общие соображения по защите корпоративной почтовой системы. Система защиты должна включать меры по защите корпоративных почтовых серверов от использования их спамерами для рассылки почты во внешний мир, а также меры по защите корпоративных пользователей от потока нежелательной корреспонденции.

В настоящей статье мы сосредоточимся на второй проблеме и, в частности, опишем конкретные методы защиты, применяемые в Microsoft® Exchange Server 2007. Но сначала сосредоточимся на одной проблеме, оставшейся вне поля зрения [1].

Если корпоративный почтовый сервер расположен позади NAT (т.е., для осуществления коммуникации с внешним миром он использует службу трансляции сетевых адресов), он легко может попасть в черные списки, что приведет к невозможности доставки корреспонденции многим получателям. И это несмотря на то, что предприняты все необходимые меры для защиты этого сервера. Дело в том, что принимающий почтовый сервер будет считать, что принимает корреспонденцию от сервера с IP-адресом, соответствующим внешнему интерфейсу службы NAT. И это абсолютно справедливо. Однако, какой-либо пользователь (или вредоносная программа на его компьютере) корпоративной сети может рассылать спам во внешний мир. При этом, принимающий такие сообщения сервер опять будет считать, что принимает их от почтового сервера с IP-адресом, соответствующим внешнему интерфейсу службы NAT. Таким образом, «отправитель» в первом и во втором случае будет как будто бы один и тот же. В результате, через несколько дней корпоративные почтовые сервера не могут отправлять корреспонденцию, поскольку IP-адрес, соответствующим внешнему интерфейсу службы NAT, попал в черные списки как спамерский сервер. Кроме того, такая несанкционированная рассылка писем может привести к существенной загрузке канала доступа к Internet.

Решение этой проблемы чрезвычайно простое. На устройстве, где выполняется служба NAT, нужно создать пакетный фильтр, разрешающий передачу пакетов во внешний мир, адресованных на порт TCP 25, только с корпоративных почтовых серверов, осуществляющих отправку внешней корреспонденции.

Подробнее об этой проблеме, а также о других причинах включения IP-адреса в черные списки см., напр., в [2]. Здесь также можно найти информацию о том, как составляются черные списки и ряд полезных советов по защите почтовой системы.

Перейдем теперь непосредственно к проблеме защиты корпоративных пользователей от потока спама. Для этого нужно создать систему, определяющую является ли передаваемое сообщение спамом или нет. В случае положительного ответа на этот вопрос, сообщение должно либо удаляться (уведомляя или не уведомляя отправителя об этом), либо помещаться в специальную карантинную зону, либо все же доставляться адресату. Определение спама можно найти, например, на сайте *www.spamhaus.org*. Это Unsolicited Bulk Email (UBE). Т.е. это нежелательное сообщение, которое может быть адресовано многим получателям. Именно сочетание двух этих положений определяет спам. Однако, многие спамеры научились обманывать антиспамовые фильтры, придерживающиеся этого канонического определения. Делается это элементарно – в начало письма, адресованного, скажем адресату *john@fabricam.com*, добавляется строка «Hello, John». Теперь это вроде бы письмо, адресованное именно получателю. С другой стороны, человек может получить приглашение на научную конференцию, которое рассылается сотням людей и зачастую начинается фразой «Уважаемые коллеги» или какой-либо аналогичной. Оно не адресовано конкретному получателю, но его нельзя назвать нежелательным сообщением. Таким образом, это не спам.

Таким образом, для определения того, является сообщение спамом или нет, нужно идентифицировать отправителя этого сообщения, о чем подробно шла речь в [1], и проанализировать содержимое сообщения. Предположим, что Вам пришло сообщение с электронного адреса, неизвестного Вам. Вы его вообще смотреть будете? Скорее всего, посмотрите на тему сообщения. Если она Вам не скажет, что это однозначно спам, наверное, бегло просмотрите содержимое сообщение. Затем, поняв, что это Вам инте-

© Товстолис А.В.

ресно, прочтете сообщение. Спамеры научились маскировать истинную тему сообщения. Однако, учитывая специфику Вашей организации, можно разработать стратегию отсечения спама по теме сообщения, хотя это далеко не всегда применимо. Вызвано это тем, что многие пользователи при переписке достаточно небрежно обращаются с темой сообщения. На основании основного содержимого сообщения можно разработать эффективную систему фильтрации. Вряд ли можно создать фильтр содержимого, абсолютно точно определяющий спам. Но, учитывая специфику Вашей организации, можно достичь очень хороших результатов. Например, для системы электронной почты университета можно смело считать спамом сообщения, содержащие такие слова или фразы как «рассылки», «акции компании», «Viagra», «проблемы с потенцией», «ликвидация предприятий» и т.п. Фильтр содержимого Microsoft® Exchange Server 2007 Edge Transport поддерживает следующую логику: «Считать спамом сообщения содержащие указанные фразы, если только сообщение не содержит следующие фразы». Например, задав в качестве фраз, говорящих о том, что сообщение не является спамом «математический факультет», сообщение, содержащее фразу «Математический факультет предлагает рассылки расписаний открытых лекций...», не будет классифицировано как спам.

Все бы было так просто, если бы спамеры не маскировали такого рода слова. Например, вместо слова «рассылочки» можно использовать «р а с с ы л о ч к и», «р-а-с-с-ы-л-о-ч-к-и», «рассыло0чки», «рассыылочки», или, что хуже всего для классификации, «расылочки». А «Viagra» как только не изменяется, например, «V1aaagra», «V!agra» или «Viiiiiaaaaagra». Когда в слова включаются цифры или специальные символы, их можно достаточно легко приводить к нормальному виду. Например, вместо «!» можно предположить, что на этом месте должно стоять «i», «no», «not», «не» или «нет». Все эти варианты можно «попробовать», проверив, есть ли полученное слово в нашем списке исключений. Множественные символы можно по одному удалять и опять-таки сравнивать с установленным списком исключений. Что касается пропущенных символов – вопрос остается открытым. Например, в слове «лета» пропущена третья буква «н» или «п», т.е. это «лента», «лепта» или просто родительный падеж слова «лето». Таким образом, даже попытки сверки со словарем будут не эффективны. Нужен интеллектуальный анализатор текста хотя бы на уровне предложения. Все остальное не даст достаточно высокой эффективности классификации спама.

Однако, грамотно настроенный фильтр содержимого в сочетании с фильтрацией отправителей позволяют добиться хороших результатов.

Теперь рассмотрим архитектуру почтовой системы Microsoft® Exchange Server 2007. Имеется пять серверных ролей:

Mailbox Server – сервер, на котором хранятся почтовые ящики пользователей. Для непосредственного обращения к почтовым ящикам используется интерфейс MAPI (Messaging Application Programming Interface).

Hub Transport Server – сервер, ответственный за маршрутизацию и доставку сообщений в пределах организации Exchange, а также за взаимодействие с сервером Edge Transport или с внешними почтовыми серверами. Последнее является не рекомендованным сценарием, хотя может использоваться в малом бизнесе при невозможности использования отдельного сервера Edge Transport.

Client Access Server – сервер, отвечающий за предоставление разнородным клиентским программам доступа к серверу Mailbox Server. Если все пользователи компании используют исключительно Microsoft® Office Outlook 2007 из локальной сети, можно обойтись без роли Client Access Server. Если нужно что-либо еще – POP3, IMAP4, Outlook Web Access, Exchange ActiveSync, Outlook Anywhere – сервер, выполняющий эту роль, предоставит нужный уровень доступа – удобно и безопасно.

Unified Messaging Server – сервер, отвечающий за унифицированные коммуникации.

Edge Transport Server – сервер, осуществляющий обмен почтовыми сообщениями с внешним миром. Он также осуществляет антиспамовую и, при условии установки специального антивирусного программного обеспечения, антивирусную фильтрацию почтовых сообщений. Компьютер, на котором установлена данная роль, не может выполнять других ролей Exchange Server и не должен быть членом Active Directory. Рекомендуется его разместить в демилитаризованной зоне (DMZ, perimeter network), отделенной брандмауэрами как от основной локальной сети компании, так и от внешнего мира. Этот сервер должен синхронизировать определенную информацию с сервером Hub Transport, а также иметь доступ к Active Directory. Сам же он не должен входить в домен Active Directory, поэтому для поиска нужной информации в Active Directory используется служба ADAM. Она входит в состав Microsoft® Windows Server 2003 R2. Если же используется Microsoft® Windows Server 2003, необходимые компоненты должны быть загружены с сайта компании Microsoft.

Далее покажем, как можно настроить механизм антиспамовой фильтрации на сервере Edge Transport. Нужно запустить Exchange Management Console и выбрать в списке серверов Edge Transport нужный сервер. Затем, используя вкладку «Anti-spam» следует настроить нужные фильтры.

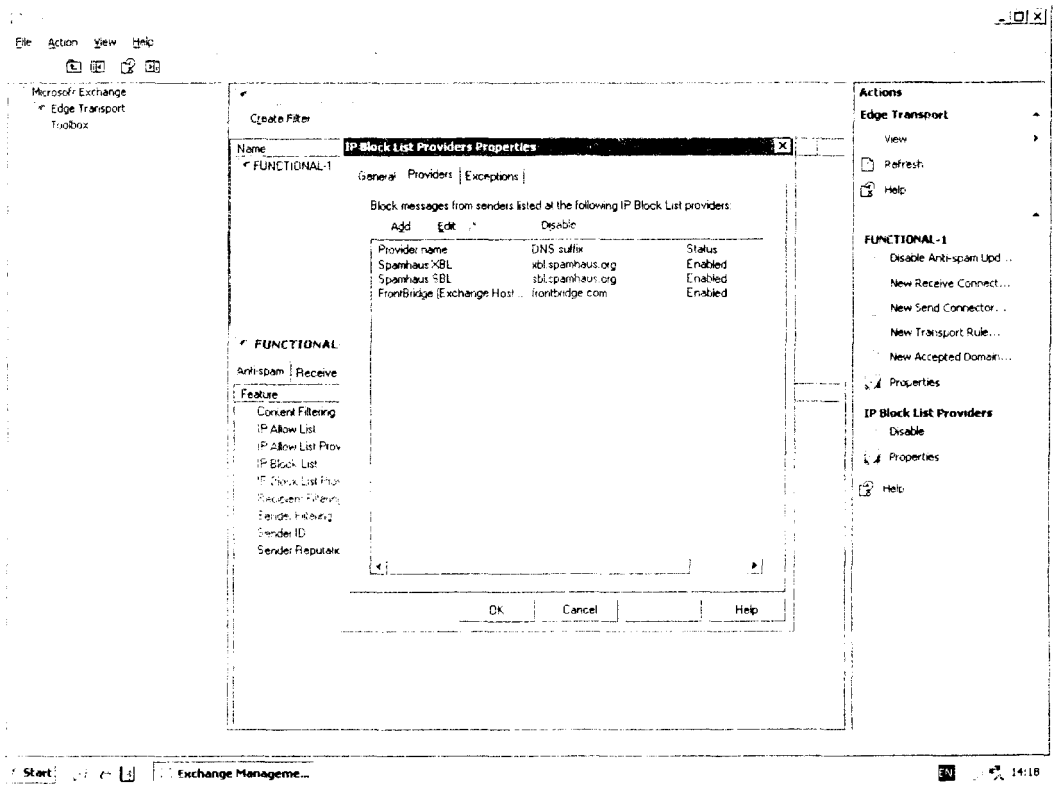


Рис. 1

Сначала можно настроить список провайдеров черных списков IP-адресов (IP Block List Providers), что позволит синхронизировать указанную информацию с черными списками организаций, занимающихся выявлением спамерских серверов (рис. 1). Такие услуги предоставляют, например, *spamhaus.org*, *Microsoft Exchange Hosted Services* и другие. Для каждого из провайдеров можно установить сообщение, которое отправляется серверу-отправителю в случае невозможности доставки сообщения в связи с тем, что он включен в черный список того или иного провайдера. Кроме того, можно вручную задать IP-адреса серверов (или целых подсетей), с которых будет запрещен прием сообщений. Для этого нужно задать параметры «IP Block List». Однако, если нужно, можно задать исключения, позволяющие конкретным корпоративным пользователям все же получать сообщения с серверов из черного списка.

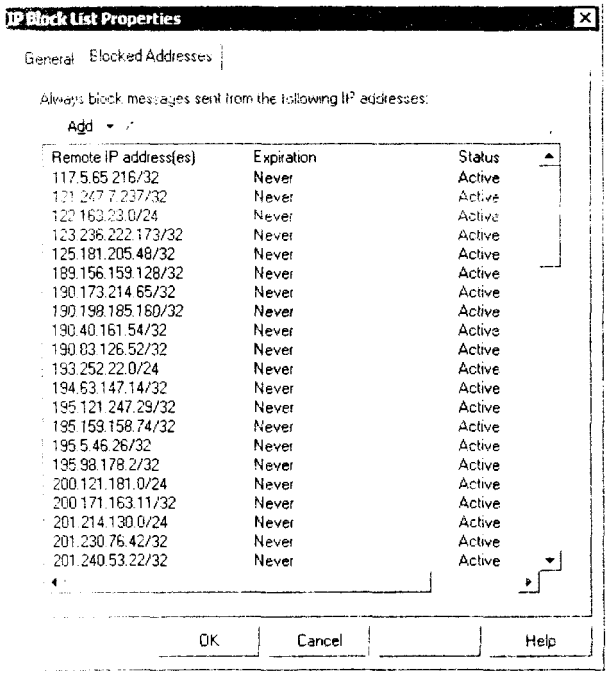


Рис. 2

IP-адреса в собственный блок лист можно вносить навсегда, либо на определенное время, по прошествии которого адрес будет удален оттуда автоматически (рис. 2). Такой параметр можно вносить для каждого IP-адреса отдельно. Однако, стоить помнить о том, что спамеры могут использовать совершенно не подозревающие об этом почтовые сервера, которые просто недостаточно защищены. Поэтому необходимо сначала убедиться в том, что сервер отправителя действительно является «подозрительным». Сначала, следует использовать инструмент из раздела Toolbox в Exchange Management Console, который называется Message Tracking. Здесь можно посмотреть, в частности, какая корреспонденция отправляется серверу в течение выбранного промежутка времени. Если одно и то же сообщение явно передается всем или даже некоторому количеству Ваших пользователей, причем, согласно теме сообщения, это явно бес-

полезные сообщения, это явно спам. Далее следует проверить, зарегистрировано ли доменное имя, соответствующее IP-адресу сервера, рассылающего его, с помощью утилиты *nslookup*. Если для него нет зарегистрированного доменного имени или по имени ясно, что это адрес динамического пула адресов, скорее всего, это спамеры занимаются рассылкой с динамически выделяемых адресов. Такие адреса можно смело включать в черный список. Сложнее, если указанный IP-адрес соответствует известному публичному почтовому серверу, например, rambler.ru. Учитывая тот факт, что администраторы таких серверов принимают меры по борьбе со спамом, включать его в черный список не следует. В крайнем случае, можно его включить туда временно, задав момент автоматического удаления (Expiration). Еще один хороший способ борьбы со спамом, это создание почтового ящика несуществующего пользователя. Если по этому адресу будет приходить корреспонденция, отправителей ее можно сразу помещать в черный список, опять-таки с поправкой на случай известных публичных почтовых серверов. Что касается серверов, рассылающих почту с динамически выделяемых IP-адресов, то их список содержится, например, в PBL организации *spamhaus.org*. Можно, конечно, включить этот список в IP Block List Providers, однако такое поведение не всегда адекватно, поскольку некоторые домашние пользователи или небольшие организации, не занимающиеся рассылкой спама, могут заниматься отправкой электронной корреспонденции с динамически выделяемых IP-адресов. С другой стороны, если прием корреспонденции из таких источников не является необходимостью, включение *pbl.spamhaus.org* в список провайдеров черных списков может отсечь подавляющее большинство спама даже без принятия других мер антиспамовой фильтрации.

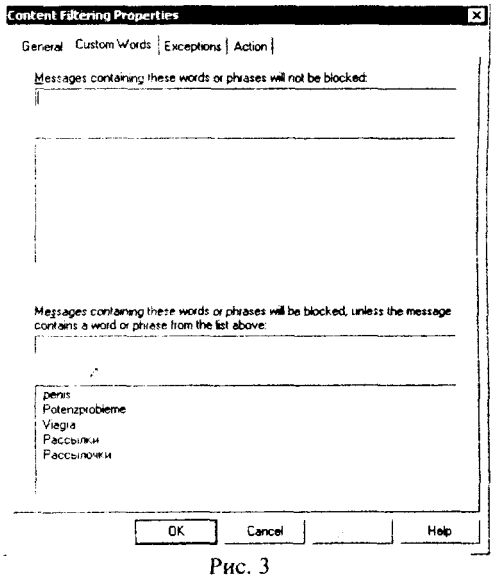


Рис. 3

Фильтрацию содержимого можно настроить, активизировав раздел «Content Filtering». Здесь можно задать ключевые фразы, появление которых в тексте сообщения приводит к тому, что сервер классифицирует такое сообщение как спам, а также фразы, появление которых в тексте сообщения производит обратный эффект. К сожалению, указанные настройки не позволяют эффективно бороться с маскировками известных ключевых слов.

Здесь же можно задать исключения, т.е. список почтовых ящиков, в которые корреспонденция все же будет доставляться, даже если она классифицирована как спам. Ведь не исключено, что кто-то из Ваших пользователей может быть заинтересован в какой-либо рекламируемой продукции, в то время как остальных пользователей от подобной рекламы следует оградить. Другой пример – Вы хотите собирать все сообщения в специальный почтовый ящик, чтобы затем исследовать динамику пересылаемых сообщений и принимать решение о блокировании источника таких рассылок в ручном режиме. Сбор пересланных сообщений может служить доказательством того, что с определенного IP-адреса осуществляется рассылка спама. Особенно полезным это может оказаться, если указанный почтовый ящик был создан исключительно для этих целей. Ведь не во всех странах мира спам не запрещен законодательно…

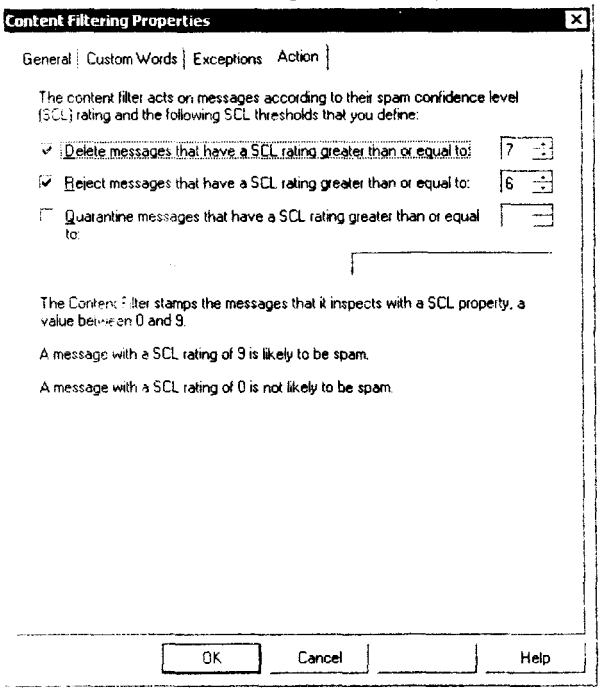


Рис. 4

К тому же, фильтрация содержимого использует некий вероятностный метод для определения того, является ли полученное сообщение спамом или нет. В результате, каждому сообщению присваивается определенный рейтинг от 0 до 9 (spam confidence level, SCL). Сообщение, которому присвоен рейтинг 9, скорее всего спам, 0 – скорее всего нет. Можно настроить поведение системы, чтобы сервер удалял сообщения без уведомления, отвергал сообщение с уведомлением отправителя или же помещал сообщения в карантин, если SCL рейтинг достигает определенного порога. На рис. 4 показан пример, где

требуется удалять сообщения с рейтингом SCL 7 и выше и отвергал сообщения с уведомлением, для которых рейтинг SCL 6 или выше. Другими словами, если сообщению присвоен рейтинг SCL 6, оно будет отвергнуто и отправителю будет отправлено соответствующее уведомление с вложенным исходным сообщением (отправлено оно будет по адресу, указанному в поле Return-Path исходного сообщения), а сообщения с рейтингом SCL 7, 8 или 9 будут просто удаляться без уведомления отправителя. При принятии решения об отвержении сообщения с уведомлением следует помнить, что спамеры обычно подписывают сообщения не своим почтовым адресом... поэтому для сообщений с высоким SCL следует просто применить удаление без уведомления. Уведомление предназначено скорее для того, чтобы уведомить не спамера, а вполне нормального отправителя о том, что его сообщение не доставлено, поскольку оно является подозрительным.

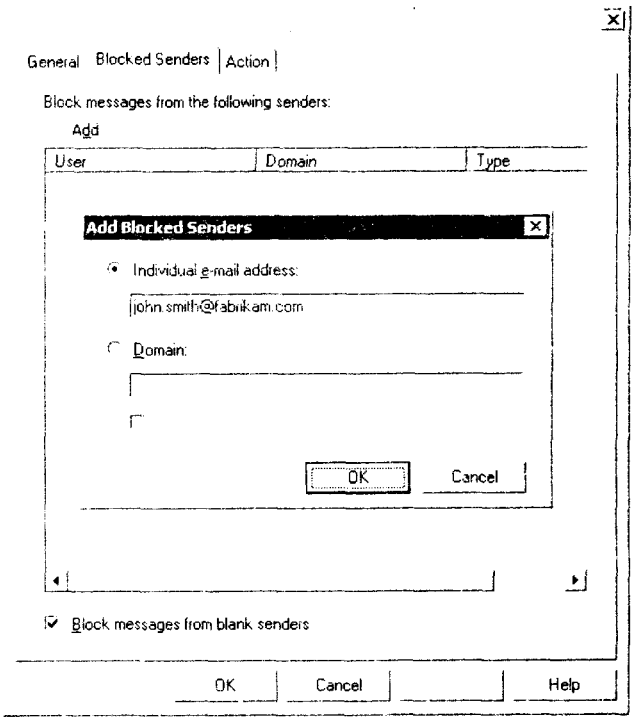


Рис. 5

Следующим шагом может стать настройка блокирования приема сообщений от определенных отправителей (рис. 5). Вкладка *Blocked Senders* панели свойств *Sender Filtering* позволяет задать список отдельных почтовых адресов или целых доменов, сообщения с которых не будут доставляться корпоративным пользователям. Вкладка *Action* позволяет задать действие, выполняемое почтовым сервером в случае обнаружения соответствия адреса отправителя одному из заданных правил блокирования. Действия эти аналогичны уже рассмотренным – сообщение можно просто удалять, либо отвергать с уведомлением отправителя. Снова отметим, что с уведомлением отправителя нужно быть осторожным, поскольку спамеры любят подписываться чужим почтовым адресом. Фильтрацию отправителей стоит рассматривать, скорее, как защиту от вполне определенных пользователей или организаций, которые уж слишком надоедают своими рассылками. Одним из примеров может служить ситуация, когда какой-либо пользователь подписался на рассылку определенной информации и не может избавиться от такой подписки. Некоторые организации имеют весьма некорректно работающую систему отказа от дальнейшей рассылки информации. Наверняка, многие из них делают это намеренно. При этом, объемы такого рода корреспонденции могут быть весьма внушительными. Пользователи даже готовы изменить свой почтовый адрес, чтобы не получать ее. Решение этой проблемы – блокировать прием корреспонденции, отправляемой с опеределенных почтовых адресов. При этом, стоит инструктировать корпоративных пользователей на предмет правил гигиены в сети Internet, объясняя, что прежде, чем сообщить о себе какую-либо информацию, необходимо точно знать, кому они ее предоставляют. Также необходимо внимательно прочитать соглашение о конфиденциальности на интересующем их Web-сайте и, в случае возникновения малейших подозрений на счет корректности использования их личной информации, не сообщать ее. Наконец, стоит включить опцию блокирования сообщений, не подписанных никаким обратным адресом.

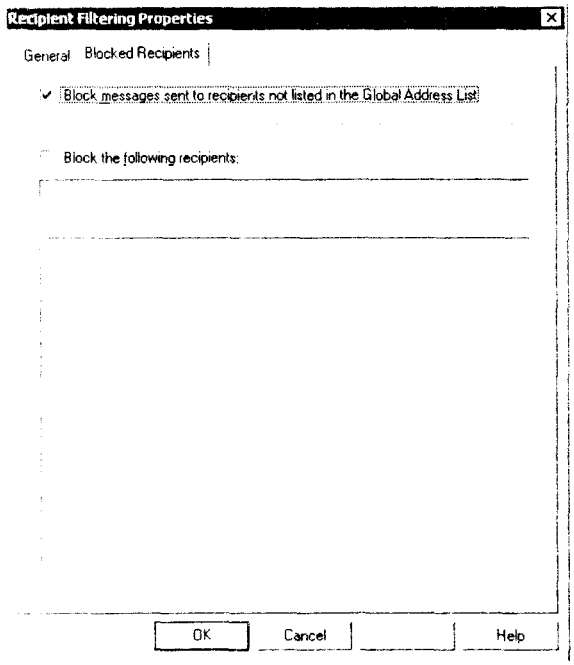


Рис. 6

Можно также блокировать доставку электронной корреспонденции определенным адресатам. Для этого нужно воспользоваться опцией *Recipient Filtering*. Во вкладке *Blocked Recipients* (рис. 6) целесообразно включить опцию блокировки

сообщений, адресованных пользователям, адреса которых не указаны в Глобальном списке адресов. Это позволит избежать принятия сообщений, отправляемых в Ваш почтовый домен без указания точного адресата. С другой стороны, нужна уверенность в том, что все адресаты, нуждающиеся во внешней корреспонденции, в этом списке находятся. Возможно, в целях безопасности, некоторые адреса просто исключены из него.

Кроме того, можно указать список почтовых адресов, которым вообще не нужна никакая внешняя корреспонденция. Это могут быть пользователи, ведущие только переписку внутри организации, а также специальные почтовые ящики, например, почтовые ящики, связанные с оборудованием. К примеру, некоторые источники бесперебойного питания (APC Symmetra и т.п.) могут рассылать почтовые уведомления об изменении своего состояния. Зачем принимать внешнюю корреспонденцию, адресованную источнику бесперебойного питания или, скажем, системе предотвращения вторжений в сеть? Такая корреспонденция – это явный спам.

К тому же Exchange Server принимает сообщения, адресованные пользователям из почтовых доменов, находящихся в списке Accepted Domains (рис. 7). Список этих почтовых доменов обычно задается на серверах организации, выполняющих роли *Hub Transport* и затем передается на *Edge Transport* во время процедуры синхронизации. Таким образом, если нужно, чтобы все вновь созданные пользователи (в т.ч. пользователи во вновь созданных почтовых доменах) сразу же получали внешнюю корреспонденцию, нужно запустить процедуру синхронизации с *Hub Transport* вручную. Для этого, из *Exchange Management Shell* нужно выполнить команду **Start Edge-Synchronization**. Отметим также, что пользователь Exchange Server может иметь несколько почтовых адресов, даже в нескольких почтовых доменах Вашей организации. Все эти почтовые адреса будут ассоциироваться с одним почтовым ящиком. Один из них будет использоваться для подписи корреспонденции, отправляемой во внешний мир. Это особенно удобно, когда происходит слияние нескольких организаций. Пользователи будут иметь адреса, соответствующие действующей корпоративной политике и в то же время корреспонденция, отправляемая на их старые почтовые адреса, будет также попадать в их почтовые ящики.

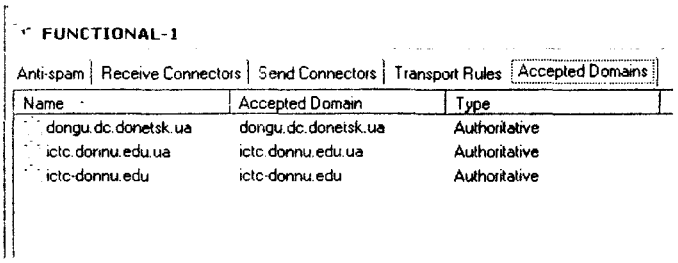


Рис.7

Exchange Server 2007 также имеет механизм проверки репутации сервера, отправляющего ему корреспонденцию. Его можно активировать, включив опцию выполнения теста *Open Proxy* для определения, насколько серверу-отправителю можно доверять (рис. 8). Тест состоит в том, что сервер пытается

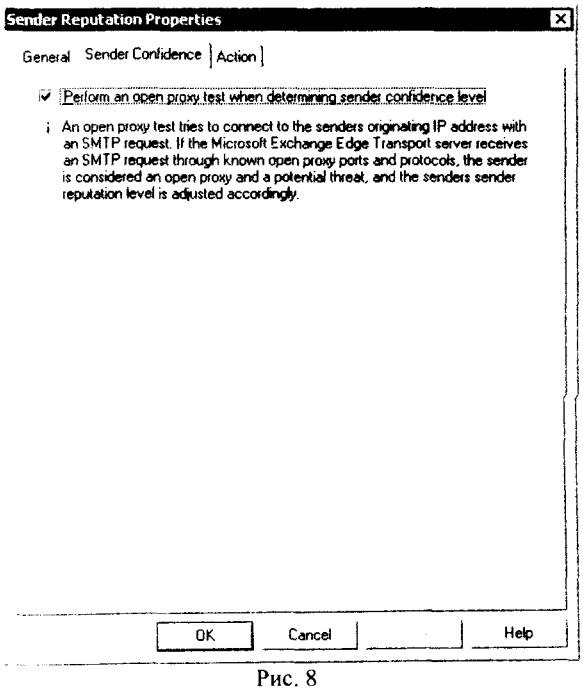


Рис. 8

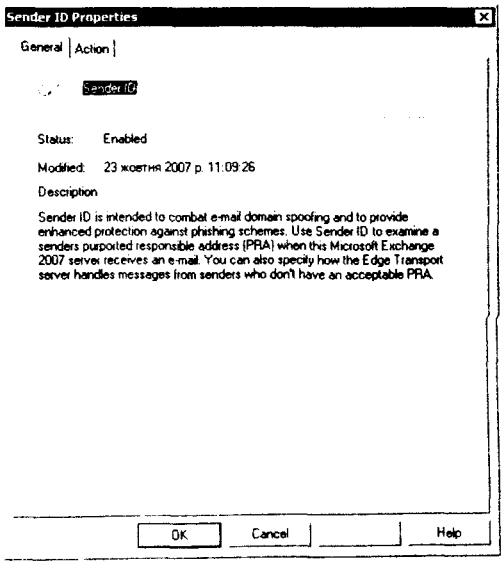


Рис. 9

подключиться (по IP-адресу) к отправителю и выполнить определенный запрос SMTP. Если сервер Edge Transport принимает запрос SMTP через известные порты open proxy и протоколы, значит, сервер отпра-

вителя недостаточно защищен и его легко могут использовать спамеры для пересылки потока своих сообщений. Таким образом, этот сервер является потенциальной угрозой и, в зависимости от результатов теста, ему присваивается определенный уровень репутации. Далее, во вкладке *Action* можно задать поведение сервера *Edge Transport* в зависимости от этого уровня – аналогично действиям, указанным в панели фильтрации содержимого (рис. 4). Такой подход позволяет снизить уровень спама, получаемого корпоративными пользователями. Однако, следует помнить о том, что это может повлечь за собой потерю корреспонденции, отправляемой Вашим пользователям со слабо защищенных почтовых серверов.

Еще одним интересным механизмом, используемым системой антиспамовой фильтрации Exchange Server 2007 является *Sender ID* (рис. 9). Сервер *Edge Transport* выполняет проверку адреса PRA (Purported Responsible Address) сервера-отправителя, когда получает электронное сообщение. Этот механизм призван выполнить проверку того, что сервер-отправитель действительно ответственен за отправку сообщений от имени почтового домена с которого якобы отправляется сообщение. Такая технология противодействует различным схемам фишинга и обмана, целью которых является завладеть персональной информацией Ваших пользователей. Подробнее о механизме проверки *Sender ID* см. в [3]. Однако, реализация этого механизма не достаточно эффективна в Microsoft® Exchange Server 2007, что иногда приводит к получению почтовых сообщений с серверов, выдающих себя за почтовые сервера других почтовых доменов. Остается надеяться, что реализация указанного механизма проверки будет усовершенствована в дальнейшем.

Отметим также, что можно выполнить операции, обратные блокированию доставки сообщений. Разделы настройки антиспамовой фильтрации *IP Allow List* и *IP Allow List Providers* позволяют разрешить доставку сообщений с определенных серверов даже в случае их попадания в рассмотренные ранее черные списки. Это может быть полезным, например, в случае необходимости приема сообщений с какого-либо сервера, попавшего, скажем, в список XBL *spamhaus.org*.

Однако, механизм антиспамовой фильтрации должен регулярно пересматриваться, чтобы он мог эффективно противостоять угрозам. Провайдеры черных списков – это очень полезная вещь, хотя ручная корректировка черных списков также нужна. Нужно регулярно просматривать поток входящей корреспонденции с целью выявления угроз и, проверив соответствующим образом отправителей подозрительной информации, включать их в черный список. С другой стороны, можно настроить уведомления отправителям, сообщения от которых блокируются, о причинах блокирования и предложить написать письмо на специальный адрес с целью исключения их сервера из черного списка. А на этот почтовый ящик принимать всю корреспонденцию и анализировать ее. Кроме того, ящики-ловушки также позволят эффективно обнаруживать источники спамерских рассылок. Все это требует регулярного мониторинга потока почтовой корреспонденции и соответствующего реагирования. В этом случае, организация получит действительно безопасную, надежную и удобную для пользователей почтовую систему.

РЕЗЮМЕ

В статті наведено конкретні рекомендації, що дозволяють захистити корпоративну поштову систему, в якій розгорнуто Microsoft® Exchange Server 2007. Спочатку розглядаються деякі загальні стратегії захисту, що з успіхом можуть бути застосовані в будь-якому програмному середовищі. Потім наводиться система налаштування сервера Exchange, що виконує роль прикордонного транспорту (Edge Transport) з метою створення повномасштабної системи захисту. В результаті, створюється система, стійка до різноманітних поштових атак, користувачі якої отримують майже вільну від спаму кореспонденцію.

SUMMARY

The article contains concrete recommendations that allow protect a corporate messaging system that has Microsoft® Exchange Server 2007 deployed. First, some common strategies are considered. These strategies may be successfully applied in any software environment. Then, some system of configuring an Exchange server that plays a role of Exchange Transport is adduced for planning a comprehensive defense system. As a result, a system resistant to various messaging attacks is deployed. The users of such system obtain an almost spam-free correspondence.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Товстолис А. В. Проблемы защиты корпоративной почтовой системы от спама. Вестник Донецкого университета. Сер. А, № 1, 2007, с.347-353.
2. Frequently Asked Questions (FAQ). Spamhaus XBL.
3. *http://www.spamhaus.org/faq/answers.lasso?section=Spamhaus%20XBL#95*
4. Sender ID Framework Overview. Verification System Aims to Reduce Spam and Increase Safety Online. *http://www.microsoft.com/mscorp/safety/technologies/senderid/overview.mspx*

Надійшла до редакції 20.11.2007 р.

УДК 004.62

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ СИСТЕМ, ОСНОВАННЫХ НА ТЕХНОЛОГИИ TEXT MINING ПРИ КАТАЛОГИЗАЦИИ INTERNET-КОНТЕНТА ПУБЛИЧНЫХ ПОРТАЛОВ

В.В.Христиановский, Н.А.Бабосюк

На данном этапе социально-экономического развития общество напрямую зависит от систем связи. Процесс глобализации влечет за собой потребность в эффективном обмене информацией. Возникает проблема перегрузки информацией.

С каждым годом увеличиваются объемы информации, с каждым годом необходимо прикладывать все больше усилий для того, чтобы выделить ее основной смысл. Сегодня в информационных хранилищах, распределенных по всему миру, собрано огромное количество информации, большую часть которой составляют неструктурированные данные. Неуклонное развитие информационных ресурсов Internet многократно усугубило проблему информационной перегрузки. Таким образом, поиск необходимой информации усложняется.

По прогнозам аналитической компании IDC, спрос на системы, которые упрощают поиск и увеличивают его эффективность, существенно возрастет в течение ближайших 4-5 лет. Так, к концу 2007 года ожидается повышение прибылей от такого ПО с $540 млн. (в 2002 году) до полутора миллиардов долларов. Такие возможности, как экспресс-анализ найденной информации, информационная разведка, формирование и ведение тематических досье с возможностью выявления тенденций и взаимосвязей персон, событий, процессов уже используются рядом крупных предприятий и наверняка будут востребованы в дальнейшем. К 2008 году такого рода программы должны стать доминирующими при анализе информации от клиентов в компаниях любого уровня.

Одной из основных составляющих современной поисковой системы является технология автоматизированного анализа и классификации информации. Необходимость в применении такой технологии вызвана тем, что около 90% ресурсов сети составляет информация, представленная на естественном языке. Одним из наиболее передовых способов экстракции данных из неструктурированного контента является применение технологии Text Mining.

Text Mining – это новый вид поиска, который, в отличие от традиционных подходов, не только находит списки документов, формально релевантным запросам, но и позволяет приблизиться к пониманию смысла документа [1].

Задача Text Mining – выбрать ключевую и наиболее значимую информацию для пользователя. Таким образом, устранена необходимость производить выборку из огромного количества неструктурированной информации. Разработанная на основе статистического и лингвистического анализа, а также методов искусственного интеллекта, данная технология предназначена для проведения смыслового анализа, обеспечения навигации и поиска в неструктурированных текстах. Можно сказать, что эта технология позволяет извлекать сущность документа, его основной смысл, специфику.

Изначально технология Text Mining в качестве основной составляющей включала в себя методы классической экстракции данных – классификация или кластеризация. В дальнейшем в Text Mining появились и дополнительные возможности, такие как автоматическое реферирование текстов и выявление феноменов, т.е. понятий и фактов. Возможности современных систем Text Mining могут применяться при управлении знаниями для выявления шаблонов в тексте, для автоматического протоколировании информации или ее распределения по интересующим пользователей профилям.

Одной из основных задач технологии является задача классификации текста, в которой используются статистические корреляции для построения правил размещения документов в предопределенные категории.

Применение принципов классификации обусловлено тем, что пользователь при поиске в сети Internet желает увидеть в результатах поиска короткий список классов, в который попадают все найденные документы. При этом к классификации предъявляются следующие основные требования:

- Классы должны содержать близкие по смысловому признаку документы;
- Этот признак должен быть основой названия класса, которое должно восприниматься пользователем.

В существующих сегодня системах классификация применяется, например, для решения таких задач, как группировка документов в Intranet-сетях и на Web-сайтах, размещение документов в определенные папки, сортировка сообщений электронной почты, избирательное распространение новостей подписчикам и пр.

В настоящее время многие ведущие производители программного обеспечения вплотную занялись разработкой и внедрением разного рода решений в области Text Mining. Заинтересованность в продуктах, использующих технологию Text Mining очень велика как среди спецслужб, государственных организаций, так и производителей программных продуктов.

© Христиановский В.В., Бабосюк Н.А.

Обычно разработанные проекты – это масштабируемые системы, в которых реализованы различные математические и лингвистические алгоритмы анализа текстовых данных. Эти системы обладают обширной функциональностью и могут применяться для всевозможных видов приложений.

Наиболее значимые из таких систем [2]:

▪ Intelligent Miner for Text (IBM) -набор отдельных утилит, запускаемых из командной строки или скрипов независимо друг от друга. Эта система является одним из лучших инструментов глубинного анализа текстов.

TextAnalyst, WebAnalyst (Мегапьютер Интеллидженс): система TextAnalyst , которая решает такие задачи Text Mining:

1.создание семантической сети большого текста,

2.подготовка резюме текста,

3.поиск по тексту и автоматическая классификация и кластеризация текстов.

Text Miner (SAS) : система для сравнения определенных грамматических и словесных рядов в письменной речи. Программа Text Miner позволяет определять, насколько правдив тот или иной текстовый документ. Обнаружение не соответствия истинности текста производится путем его анализа и выявления изменений стиля письма, которые могут возникать при попытке исказить или скрыть информацию.

▪ SemioMap (Semio Corp.): первая система Text Mining, работающая в архитектуре клиент-сервер. Система SemioMap состоит из двух основных компонент – сервера SemioMap и клиента SemioMap. Работа системы протекает в три фазы: индексирование (сервер SemioMap автоматически читает массивы неструктурированного текста, извлекает ключевые фразы (понятия) и создает из них индекс); кластеризация понятий (сервер SemioMap выявляет связи между извлеченными фразами и строит из них, на основе совместной встречаемости, лексическую сеть («понятийную карту»); графическое отображение и навигация (визуализация карт связей, которая обеспечивает быструю навигацию по ключевым фразам и связям между ними, а также возможность быстрого обращения к конкретным документам).

▪ Oracle Text (Oracle): программный комплекс, интегрированный в СУБД, позволяющий эффективно работать с запросами, относящимися к неструктурированным текстам. При этом обработка текста сочетается с возможностями, которые предоставлены пользователю для работы с реляционными базами данных. Основной задачей, на решение которой нацелены средства Oracle Text, является задача поиска документов по их содержанию – словам или фразам, которые при необходимости комбинируются с использованием булевых операций. Результаты поиска ранжируются по релевантности, с учетом частоты встречаемости слов запроса в найденных документах.

▪ Knowledge Server (Autonomy): система статистического контент-анализа; объединяет интеллектуальный парсинг по шаблонам со сложными методами контекстного анализа и извлечения смысла для решения задач автоматической классификацию и организации перекрестных ссылок. Основное преимущество системы Autonomy – мощные интеллектуальные алгоритмы, основанные на статистической обработке. Эти алгоритмы базируются на информационной теории Клода Шаннона, Байесовых вероятностях и нейронных сетях.

▪ InfoStream (Информационный центр «ЭЛВИСТИ»)

Ядром механизма обработки контента InfoStream является полнотекстовая информационно-поисковая система InfoReS. Эта система позволяет создавать полнотекстовые базы данных и осуществлять поиск информации, формировать тематические информационные каналы, автоматически рубрицировать информацию, формировать дайджесты, таблицы взаимосвязей понятий (относительно встречаемости их в сетевых публикациях), гистограммы распределения весовых значений отдельных понятий, а также динамики их встречаемости по времени. Технология InfoStream позволяет обрабатывать данные в форматах MS WORD (DOC, RTF), PDF, и всех текстовых форматов (простой текст, HTML, XML).

Одним из основных недостатков данных программ является их высокая стоимость. Это объясняется сложностью реализации систем такого масштаба а также спросом на рынке новых технологий. Также к недостаткам можно отнести чисто коммерческий интерес при разработке. Часто разработанные продукты являются средством привлечения клиентов к старым продуктам. Кроме того необходимо заметить, что большая доля этих продуктов не рассчитана на применение для русскоязычных ресурсов.

В связи с вышесказанным можно сделать вывод о том, что в данный момент достаточно актуально и перспективно применение подобных технологий во всевозможных поисковых системах и других системах, работающих с документами. Таким образом, целесообразно разработать собственную систему, основанную на технологии Text Mining, ориентированную на применение в публичных Internet-порталах. При этом необходимо обеспечить средства мониторинга эффективности функционирования данной системы с целью изучения возможностей технологии Text Mining при применении ее в реальных условиях работы.

Основной функциональностью программного комплекса выступает автоматизированная классификация документов публичного портала. Поэтому для реализации целей исследования поставлена задача систематизировать с помощью классификации документы публичного портала. Для осуществления

задачи необходимо разработать алгоритм контент-мониторинга текста, и на основе его результатов произвести классификацию документов.

В качестве составляющих разработки алгоритма можно выделить этапы:

1.Формирование списка файлов заданных типов:

1.1. осуществление поиска файлов в структуре директорий;

1.2. проведение фильтрации файлов по типу (по расширению);

1.3. определение неизменности каталогизированных файлов (дата последнего изменения);

1.4. отсев ранее каталогизированных файлов.

2.Проведение анализа содержимого файлов на предмет принадлежности к тем или иным классам:

2.1. проведение поиска ключевых слов в документе;

2.2. отсев незначащих слов;

2.3. определение веса слов в зависимости от частоты появления в документе;

2.4. формирование упорядоченных по убыванию списков ключевых слов для данного документа, базирующийся на весе слов;

2.5. обновление базы ключевых слов для каждой категории (привязка новых слов к категориям).

2.6. подтверждения правильности назначенной категории экспертом;

2.7. модификация весов слов для подтверждения эффективности алгоритма категоризации.

3.Сбор и сохранение в файле статистических данных:

3.1. сохранение данные о количестве найденных документов в каталоге, категоризированных документах, документах, категория которых была подтверждена экспертом, данных о пороге веса слов и проценте категоризации документов;

3.2. по статистическим данным построение графиков эффективности алгоритма классификации в зависимости от изменения параметров каталогизации.

В результате работы сформировалась следующая структура проекта.

Пакет программ составляют следующие модули:

- Spider – сканер каталогизируемых файлов. Выполняет поиск asp-, txt-,htm- и html-файлов, не каталогизированных ранее, и выполняет процесс категоризации. Так же данная программа позволяет регулировать параметры категоризации: процент категоризации, ограничение веса ключевых слов.
- CatEditor – редактор категорий. Позволяет эксперту управлять базой категорий.
- StatGraph – визуализатор статистики. Показывает динамику классификации документов на основе логов модуля Spider.

Основная функциональность проекта базируется на алгоритме классификации. Данный алгоритм сравнивает слова, составляющие категоризируемый документ с ключевыми словами категории, сформированными экспертом на основе ресурсов сайта.

Множество категорий программы включают в себя категорию Фильтр, которая содержит стоп-слова – слова, которые будут отсеиваться как незначащие (по мнению эксперта) при отборе новых ключевых слов в анализируемых документах. В словарь стоп-слов изначально эксперт добавляет предлоги, междометия, союзы и т.п., специальные символы, цифры, не несущие смысловую нагрузку слова (напр. «работа», «задание»).

Остальные категории создаются экспертом в процессе работы с ресурсами. Каждая категория на уровне структуры проекта представляет собой набор из имени категории, ключевых слов, и весов ключевых слов.

Изначально каждому ключевому слову, составляющему категорию назначается вес w_i=1.

После этого выполняется процесс сравнения списка слов, выделенных из анализируемого документа (без учета стоп-слов) с ключевыми словами категорий.

В случае если ключевое слово встречается в анализируемом документе неоднократно, то вес слова вычисляется по следующей формуле:

$$W_i = f_i * w_i,$$

где i – индекс категории ($0 \le i \le n$, где n – количество категорий в базе); f_i – количество вхождения слова в документ; w_i – первичный вес слова.

Увеличение веса слова автоматически увеличивает вес категории. Тогда вес категории вычисляется следующим образом:

$$\Omega_j^{кат} = \sum W_i^{совп}$$

где j-индекс категории; $\sum W_i^{совп}$ -сумма весов ключевых слов, совпавших со словами документа.

После того, как для текущего документа посчитан вес каждой категории, среди них выбирается та категория, у которой вес будет максимальный.

Эта категория автоматически назначается документу алгоритмом, и эксперту предоставляется возможность подтвердить ее правильность. Если эксперт подтверждает правильность выбора категории, то вес, измененный в процессе категоризации, сохраняется в памяти, иначе вес сбрасывается до значения на предыдущем эксперименте.

От эксперимента к эксперименту ключевые слова категории, которая назначается алгоритмом, увеличивают свой вес; в свою очередь растет значимость категории, т.е. у нее появляется больше шансов быть назначенной документу в случае, если возникает спорная ситуация (например, процент совпавших ключевых слов в двух категориях совпадают, но у первой вес категории выше, значит она и будет назначена документу).

Таким образом, это увеличивает значимость категории, что позволит в дальнейшем более точно назначать категории документам, и формирует когнитивную составляющую алгоритма.

Чтобы продемонстрировать эффективность работы алгоритма классификации были проведены эксперименты по оценке влияния параметров алгоритма на эффективность категоризации. Были выбраны следующие параметры:

- порог веса ключевых слов: ограничивает максимальный вес слов категории;
- процент категоризации документов: указывает, какой минимальный вес должна иметь категория (по отношению к суммарному количеству слов в документе), чтобы служить признаком принадлежности документа категории.

На представленном ниже графике (см. рис.1) отображена динамика классификации в зависимости от изменения вышеуказанных параметров.

Кривая №1 демонстрирует изменение значений веса ключевых слов на каждом эксперименте.

Кривая №2 показывает изменение значения процента категоризации на каждом эксперименте.

Кривая №3 демонстрирует эффективность работы алгоритма классификации при текущих значениях параметров классификации. Она показывает процент категоризированных документов от общего числа найденных документов в текущем эксперименте.

Эмпирическим путем установлено, что пересечение ключевых слов категории со словами документа практически никогда не превышает 5%, что позволяет считать значение «5%» верхним порогом параметра «процент категоризации документов».

Влияние процента категоризации на результаты работы программы представлены на рис. 1:

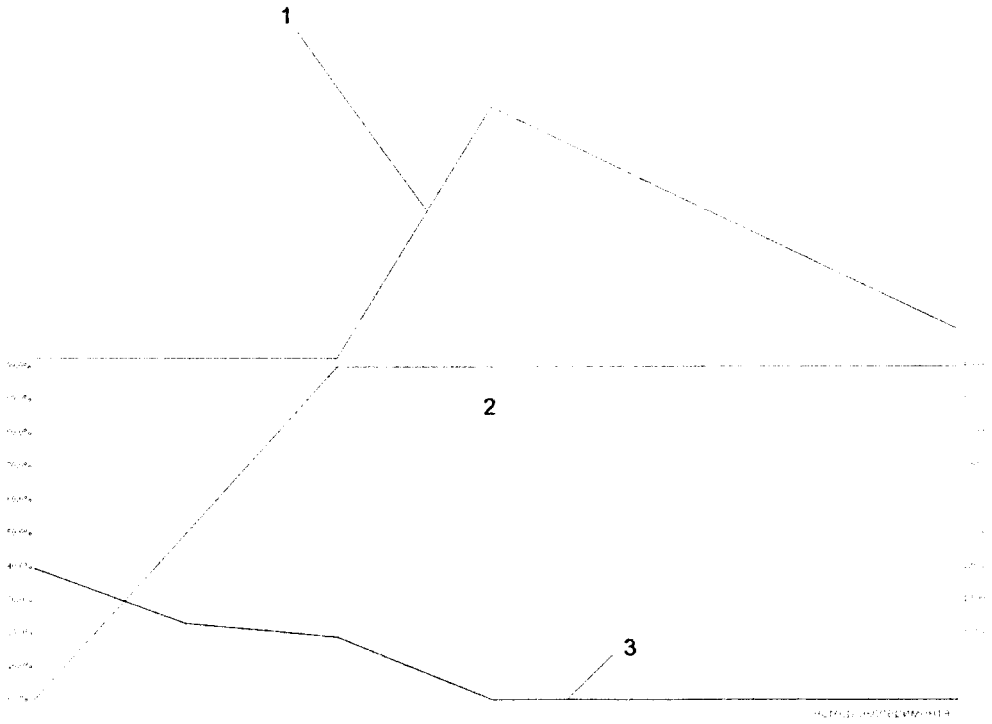


Рис. 1. График влияния процента категоризации и порога веса ключевых слов на результаты работы программы

Эксперимент проводится в каталоге, содержащем 6 файлов.

Сначала устанавливается процент категоризации, равный 0% (см. рис. 1). В таком случае в результате классификации категоризировалось 40% от общего числа документов.

Продолжаем изменять значение процента категоризации: при 2.5% классифицируется 24% документов, а при 5% – 19% документов.

Далее, не меняя значение процента категоризации, изменяем значение параметра «порог веса слов». Ограничив вес значением «5», результат эксперимента был сведен к тому, что не был классифицирован ни один документ. Дальнейшее изменение значения порога веса слов не повлияло на изменение результатов классификации.

Демонстрация эффективности алгоритма при взаимном варьировании параметров категоризации представлены на рисунке 2:

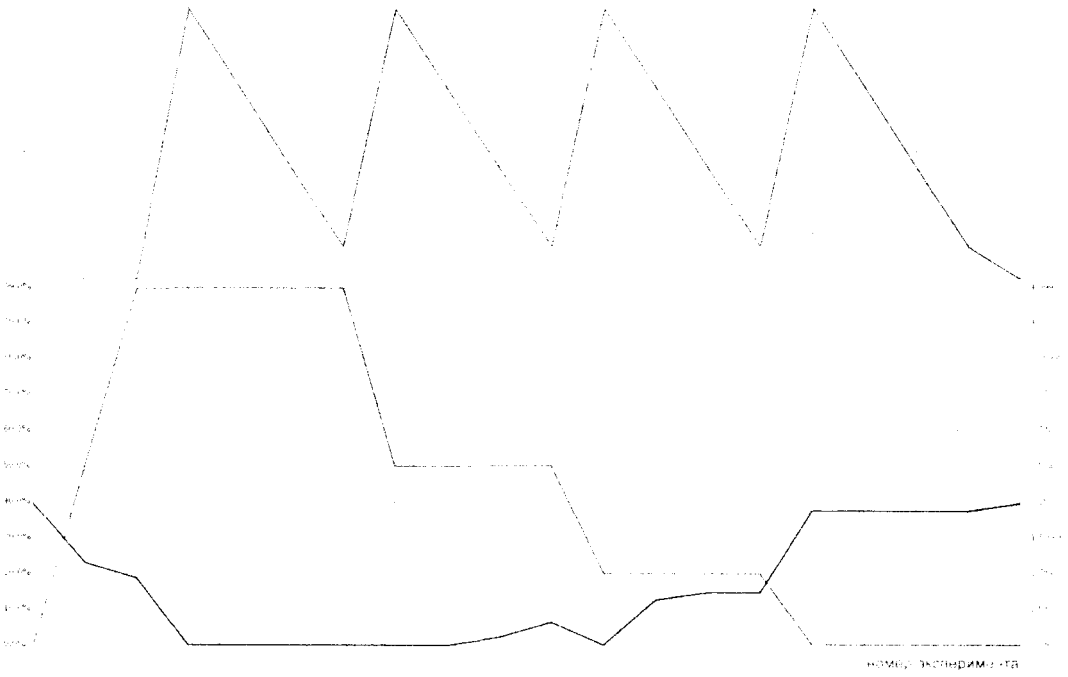


Рис. 2. График эффективности алгоритма при взаимном варьировании параметров категоризации

На начальном этапе эксперимента наращивается вес ключевых слов категории: увеличивается процент категоризации и не изменяется порог веса слов. Таким образом, произошло обучение – произошло накопление знаний о правильности назначения категории. После этого при фиксированном значении процента категоризации изменяется порог веса слов. При увеличении порога веса слов при неизменном проценте категоризации, увеличивается процент категоризированных документов. Данный эксперимент проводится на всем множестве значений параметра «процент категоризации».

Проведенные эксперименты показали:

1.применение динамически накапливаемых весов как механизма ранжирования значимости слов в категории является высокоэффективным инструментом в самообучении, обеспечивает более точную автоматизированную категоризацию документов;

2.минимальный процент категоризации обеспечивается управлением уровнем достоверности принимаемых системой решений и может применяться для установки разного уровня погрешности в работе;

3.ограничение максимального веса слов имеет практическое значение только на стадии эксперимента и позволяет доказать эффективность разработанного алгоритма классификации.

Выводы

В результате проделанной работы разработан пакет приложений, позволяющий классифицировать asp-, txt-,html- и htm- ресурсы сайта. Это позволяет систематизировать текстовые ресурсы и упрощает поиск на сайте, делая его более эффективным для пользователя.

Результаты работы алгоритма классификации показывают свою эффективность, управляемость и надежность в реальных условиях. В процессе проведения исследований подтвержден когнитивный эффект алгоритма.

Таким образом, технология Text Mining является высокоэффективной для упорядочивания информации публичных порталов, и ее развитие позволит в будущем качественно и быстро управлять различными Internet-ресурсами.

РЕЗЮМЕ

Розроблений пакет програм, що дозволяє класифікувати web-ресурси. Розроблений алгоритм класифікації, заснований на принципі навчання категорій за допомогою нарощування ваги слів у процесі роботи програми. Досліджена ефективність алгоритму класифікації.

SUMMARY

The application which allow to classify web-resources is developed. The algorithm of classification which based on principle of categories teaching with the help of words weight increase in the process of work of the program is developed. Efficiency of classification algorithm is explored.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ланде Д.В. Поиск знаний в Internet. Профессиональная работа.: Пер. с англ. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2005. – 272 с., ил. – Парал. тит. англ.
2. Ланде Д.В. Добыча знаний (http://www.visti.net/~dwl/art/dz/).
3. Линючев П. Text Mining: современные технологии на информационных рудниках (http://www.pcweek.ru/?ID=625342).
4. Манаев О.Т. Контент-анализ – описание метода (http://psyfactor.org/lib/kontent.htm).
5. Паршин П. Контент-анализ. Кругосвет. Энциклопедическая статья. (http://www.krugosvet.ru/articles/92/1009214/1009214a4.htm).
6. Праці студентської наукової конференції фізичного факультету Донецького національного университету за період 2006-2007 учбового року: Збірник наукових праць. – Донецьк: ДонНУ, 2007. – 75 с.
7. Холод И., Степаненко В., Куприянов М., Баргесян А. Технологии анализа данных: Data Mining, Visual Mining, Text Mining, OLAP 2006 г. – СПб., Издательство BHV, 2006 г. – 384 стр.

Надійшла до редакції 30.05.2007 р.

УДК 15 + 519.7

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА СХОДСТВА ДЛЯ ОБОБЩЁННОЙ МОДЕЛИ АССОЦИАТИВНОЙ ПАМЯТИ ЧЕЛОВЕКА

Т.Г.Петренко, Ю.С.Резниченко

Подходы когнитивной математики позволяют развивать современные исследования в области изучения механизмов долговременной памяти человека. Целью исследований является разработка и модификация математических моделей долговременной памяти.

Последние исследования в области изучения механизмов ассоциативной памяти человека связаны с развитием модели квантовой ассоциативной памяти [1, 2] и развитием подхода к учёту многофакторного влияния на механизмы памяти различных параметров, который получил в когнитивной психологии название «матрица Эстеса» [3]. Данные модели в оригинальной форме не позволяют эксперту учесть и проконтролировать отдельные факторы, важность которых имеет первостепенный характер для исследований ассоциативной памяти.

В результате структурного анализа выбранных моделей [1, 3] выявлена возможность построения обобщённой модели ассоциативной памяти обучаемого человека (модели GM). Особенности построения модели GM обусловлены спецификой предметной области. Объектом исследований являются механизмы ассоциативной памяти. Ассоциативная память определяется как специализированная подсистема долговременной памяти, которая обрабатывает связи между стимулами и реакциями. В памяти информация, такая как стимулы, реакции, а также ассоциативные связи между ними, представлена в виде энграмм.

Энграмма – след в памяти, сформированный в результате обучения [4]. Энграммы характеризуются различной степенью активизации. Выделяют активные и латентные энграммы. Активные энграммы воспроизводятся в требуемый момент времени. Латентные энграммы не могут быть воспроизведены в требуемый момент времени, но могут быть активированы позже.

Энграммы как объекты представления, распознавания и воспроизведения в памяти обладают различной устойчивостью в момент обработки в памяти. По свойству устойчивости принято выделять сильные, смешанные и слабые энграммы [2]:

- сильная энграмма – устойчивая для хранения в долговременной памяти;
- смешанная энграмма – с неопределённым значением устойчивости для долговременной памяти;
- слабая энграмма – неустойчивая для хранения в долговременной памяти.

Совокупность энграмм с различной степенью активизации описывает состояние памяти [1]. Формирование и преобразование состояний памяти отражают процессы в памяти, которые позволяет описывать разработанная авторами модель GM. В работе изучены процессы представления, распознавания и воспроизведения в памяти.

Изначально для построения модели GM был использован квантовый подход. Традиционно формальное представление состояния памяти в модели квантовой ассоциативной памяти [1, 2] имеет векторный вид:

$$m^{\tau} = \left(a_{x_1} a_{x_2} \ldots a_{x_n}\right) \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \ldots \\ x_n \end{pmatrix}, \qquad (1)$$

где τ – момент времени; m^{τ} – состояние памяти в момент времени τ; x_i – энграмма; a_{x_i} – степень активизации энграммы; n – число энграмм; $i = 1,2,\ldots,n$.

Векторное представление базируется на вероятностных оценках влияющих факторов.

Алгоритм воспроизведения информации в памяти начинается с инициализации модели GM – формирования начального состояния памяти. После инициализации циклически выполняется квантовое преобразование состояний памяти. Таким образом, моделируется повторяющийся процесс преобразования информации в памяти. Каждое преобразование состоит из двух шагов.

Первый шаг преобразования имеет вид:

© Петренко Т.Г., Резниченко Ю.С.

$$a_{x_i}^{\tau+0.5} = a_{x_i}^{\tau} - 2 \cdot \left(a_{x_1}^{\tau} a_{x_2}^{\tau} ... a_{x_n}^{\tau}\right) \cdot \begin{pmatrix} b_{x_1} \\ b_{x_2} \\ ... \\ b_{x_n} \end{pmatrix} \cdot b_{x_i}, \qquad (2)$$

где τ – момент времени; $a_{x_i}^{\tau}$, $a_{x_i}^{\tau+0.5}$ – значения степени активизации i-ой энграммы; b_{x_i} – эталонное значение степени активизации i-ой энграммы; n – число энграмм; $i = 1,2,...,n$.

Второй шаг преобразования имеет вид:

$$a_{x_i}^{\tau+1} = 2 \cdot \left(a_{x_1}^{\tau+0.5} a_{x_2}^{\tau+0.5} ... a_{x_n}^{\tau+0.5}\right) \cdot \begin{pmatrix} a_{x_1}^{0} \\ a_{x_2}^{0} \\ ... \\ a_{x_n}^{0} \end{pmatrix} \cdot a_{x_i}^{0} - a_{x_i}^{\tau+0.5}, \qquad (3)$$

где τ – момент времени; $a_{x_i}^{\tau+0.5}$, $a_{x_i}^{\tau+1}$ – значения степени активизации i-ой энграммы; $a_{x_i}^{0}$ – начальные значения степени активизации i-ой энграммы; n – число энграмм; $i = 1,2,...,n$.

Совместно описанные шаги представляют одну итерацию алгоритма воспроизведения. Двухшаговое преобразование состояний позволяет формально контролировать ситуацию, которая формируется при обучении некоторой системы, по аналогии с механизмом научения человека.

Преобразование состояний дискретно во времени, причём шкала времени является ситуационной. То есть наступление следующего момента времени связано с очередной итерацией обработки информации в памяти.

В каждый момент времени критерий качества преобразования определяет близость текущего состояния к состоянию, когда степень активизации воспроизводимой в памяти энграммы максимальна, а степень активизации всех остальных энграмм монотонно приближается к минимуму. Последовательность состояний памяти, формирующихся в ходе преобразования, характеризует ситуацию воспроизведения и завершается конечным состоянием – состоянием наученности.

Анализ квантового подхода к построению обобщённой модели ассоциативной памяти выявляет проблемы отсутствия полного описания ситуаций, недостаточного объёма статистической выборки, выполнимости «идеального эксперимента» и изменяющихся во времени условий исследования.

Существующие компьютерные эксперименты с характеристиками ассоциативной памяти, по сути, являются тренажёрами для обучаемых. Поэтому возникает необходимость разработки нового компьютерного эксперимента, поддерживающего внутреннюю базу для исследований с помощью обобщённой модели ассоциативной памяти.

Перечисленные факты стали предпосылками для разработки специальной схемы исследования. Схема исследования соединяет построение усовершенствованной, нечёткой модели GM с использованием результатов компьютерного эксперимента. На данном этапе развития нечёткой модели GM схема включает пять этапов.

Параметрическая идентификация модели GM на первом этапе схемы заключается в оценивании влияния фактора «сходства» на запоминание данных о некоторой предметной области.

С целью выполнения нечёткого прогнозирования начального состояния модели GM на втором этапе схемы решаются две основные задачи. Первая задача состоит в выделении чётких и нечётких факторов, влияющих на параметры ситуации воспроизведения в памяти – значения степени активизации энграмм. Для этого выполняется анализ основных свойств энграмм – степень активизации, устойчивость – и факторов продуктивности обучения человека. Влияющие факторы могут быть описаны как уровни дерева. На каждом уровне взаимосвязь факторов выражается с помощью чёткой либо нечёткой зависимости. Вторая задача состоит в построении систем нечёткого вывода для уровней, содержащих зависимости с учётом нечётких факторов.

Инициализация модели GM на третьем этапе схемы заключается в установлении начальных значений степени активизации энграмм. Традиционный векторный вид представления состояния памяти (формула (1)) заменяется представлением операциями преобразования над нечёткими множествами.

Четвёртым этапом схемы является трансформация модели GM. На четвёртом этапе выполняются квантовые преобразования состояний по формулам (2), (3).

На пятом этапе схемы выполняется проектирование компьютерного эксперимента. Целью проведение компьютерного эксперимента является параметрическая идентификация модифицированной модели GM. Результаты компьютерного эксперимента последовательно используются при реализации этапов схемы.

В данной работе рассмотрим подробнее реализацию первого этапа разработанной схемы. Задачей первого этапа является разработка метода определения чёткого фактора сходства для модели GM. Для решения задачи был изучен характер ассоциативных связей, обрабатываемых в памяти обучаемого человека при воспроизведении информации.

Энграммы отражают в памяти ассоциативные связи между элементами информации. По сути, ассоциативные связи являются основными объектами процессов представления, распознавания и воспроизведения в памяти собственно элементов информации [4]. В модели когнитивной матрицы У.К. Эстеса изучаемые процессы в памяти имеют свойства классификационных (категоризационных) процессов [4]. Поэтому состояние памяти отражает результат категоризационных процессов.

Категоризационные процессы представляют элементы информации через результат отображения в памяти существенных признаков элементов информации. Поэтому в модели когнитивной матрицы У.К. Эстеса элемент информации интерпретируется через систему ассоциативных связей с другими элементами информации. Сложную систему ассоциативных связей между элементами информации можно разбить на единичные связи. Единичные ассоциативные связи попарно объединяют элементы информации.

Рассмотрим упрощённое представление информационного пространства в памяти [4]. Ассоциативные связи выявляются в результате сравнения существенных признаков элементов информации. Проявлением ассоциативной связи элементов являются категории. Категории выделяются, по крайней мере, по трём характеристикам: по сходству, по контрасту и по контексту. Поэтому формирование индивидуально обозначенных обучаемым человеком категорий позволяет строить гибкие, многоуровневые модели ситуаций воспроизведения энграмм в памяти.

Например, рассмотрим разработку метода определения коэффициента сходства в применении к предметной области «язык программирования Borland Pascal». В примере выбраны словесно-логические элементы информации: ключевые термины языка и категории терминов. Выбран способ формирования категорий – объединение терминов в пару по характеристике сходства и именование типа ассоциативной связи. Введение категорий по характеристике сходства позволяет учитывать фактор сходства существенных признаков терминов. Влияние фактора выражает параметр модели GM – коэффициент сходства.

По характеристике сходства были выделены четыре существенных признака терминов:

a) «парность» – для двух терминов означает, что они образуют одну пару;
b) «предложенная категория» – категория, объединяющая два термина в пару по характеристике сходства, обучаемый человек выбирает категорию из набора предложенных категорий;
c) «обозначенная категория» – категория, объединяющая два термина в пару по характеристике сходства, обучаемый человек образует категорию самостоятельно;
d) «парный элемент» – для двух терминов означает, что они образуют пары с одним и тем же третьим термином.

Коэффициент сходства зависит от меры сходства признаков терминов [3]. Поэтому выделены четыре составляющие фактора сходства. Каждая составляющая характеризует уверенность эксперта в том, что обучаемый человек устанавливает сходство терминов в паре по соответствующему признаку. Выполнена оценка влияния составляющих фактора на коэффициент сходства. Степень влияния фактора выражена уточняющими коэффициентами:

a) коэффициент распознавания парности;
b) коэффициент распознавания предложенной категории;
c) коэффициент распознавания обозначенной категории;
d) коэффициент воспроизведения парности.

Коэффициент распознавания парности характеризует долю ассоциативно связанных пар терминов от общего числа пар терминов.

Коэффициент распознавания предложенной категории характеризует степень точности, с которой категория отражает сходство терминов в паре. Экспертом выделены и предложены для выбора обучаемому человеку пять видов категорий. Построена шкала значений коэффициента с равным шагом. Градации шкалы сопоставлены с видами категорий:

«Категория, не связанная с областью знаний»	0.00
«Неправильная категория»	0.25
«Обобщённая категория»	0.50

«Категория, родственная точной»	0.75
«Точная категория»	1.00

Коэффициент распознавания обозначенной категории также характеризует степень точности, с которой категория отражает сходство элементов в паре. Для выбора обучаемому человеку в качестве «точной категории» предлагается индивидуально обозначенная категория.

Сравнение коэффициентов распознавания категорий показывает, насколько ассоциация, индивидуально установленная обучаемым человеком, соответствует общеупотребительной ассоциации (предложенной экспертом). Также можно определить, выделение какой из ассоциаций – индивидуально обозначенной или предложенной – эффективно ограничивает поток ассоциаций, возникающий при отборе признаков терминов в памяти обучаемого человека.

Коэффициент воспроизведения парности характеризует долю полезных ассоциаций от общего числа ассоциаций в памяти обучаемого человека.

Диапазон изменения уточняющих коэффициентов [0, 1]. Уточняющие коэффициенты не равнозначны. Проанализированы возможные комбинации мер сходства по признакам [5, 6]. Сравнение сходства признаков отражает ассоциативные связи терминов внутри категории, а также терминов между категориями. Меры сходства по каждому признаку сопоставлены с соответствующим уточняющим коэффициентом. В случае совпадения признака для двух терминов мера сходства принимает максимальное значение коэффициента сходства $S_{\max} = 1$. В противном случае мера сходства принимает значение коэффициента сходства S, удовлетворяющее условию $0 \le S < 1$. Перебор комбинаций приведен в таблице 1.

Таблица 1. Сопоставление уточняющих коэффициентов с мерами сходства признаков терминов

	Коэффициент распознавания парности	Коэффициент распознавания предложенной категории	Коэффициент распознавания обозначенной категории	Коэффициент воспроизведения парности
Ассоциативная связь между терминами внутри категории	S	S	S	$S_{\max}$
	S	S	$S_{\max}$	$S_{\max}$
	S	$S_{\max}$	S	$S_{\max}$
	S	$S_{\max}$	$S_{\max}$	$S_{\max}$
	$S_{\max}$	S	S	$S_{\max}$
	$S_{\max}$	S	$S_{\max}$	$S_{\max}$
	$S_{\max}$	$S_{\max}$	S	$S_{\max}$
	$S_{\max}$	$S_{\max}$	$S_{\max}$	$S_{\max}$
Ассоциативная связь между терминами разных категорий	S	S	S	S
	S	S	$S_{\max}$	S

В результате анализа построенной «матрицы Эстеса» получены доли совпадений признака от общего числа сравнений по признаку, сопоставленные с уточняющими коэффициентами. С помощью полученных значений и граничных значений уточняющих коэффициентов выведены веса.

Введение взвешенных уточняющих коэффициентов позволяет разложить коэффициент сходства на составляющие по формуле (4).

$$S = \frac{0.4 \cdot F_1 + 0.8 \cdot F_2 + 1.1 \cdot F_3 + 1.7 \cdot F_4}{4}, \qquad (4)$$

где S – коэффициент сходства; F_1 – коэффициент распознавания парности; F_2 – коэффициент распознавания предложенной категории; F_3 – коэффициент распознавания обозначенной категории; F_4 – коэффициент воспроизведения парности.

Таким образом, коэффициент сходства есть взвешенное среднее введенных уточняющих коэффициентов.

Для подтверждения целесообразности предложенных авторами теоретических идей разработан новый компьютерный эксперимент. Рассмотрим описание этапов компьютерного эксперимента на примере предметной области «язык программирования Borland Pascal».

В первой части компьютерного эксперимента эксперт формирует наборы входных данных. Элементом входных данных является термин, группирующим элементом является категория по характеристике сходства. Вторая часть компьютерного эксперимента предполагает выполнение обучаемым человеком этапов:

1. Этап распознавания парности в памяти. Предъявляются 14 пар терминов без повторений. Из них 7 пар терминов – подходящие – включают термины языка Borland Pascal (термин-стимул и термин-реакцию). Остальные 7 пар терминов – неподходящие – сочетают посторонние термины. Порядок предъявления пар терминов произвольный. Обучаемый человек должен выбрать 7 подходящих пар.
2. Этап категоризации. Предъявляются 7 подходящих пар терминов этапа 1. Обучаемый человек должен для каждой пары терминов ввести категорию по характеристике сходства терминов.
3. Этап распознавания предложенной категории в памяти. Предъявляются 7 подходящих пар терминов и категории 5-ти разных видов. Все категории формируются экспертом. Обучаемый человек должен из предложенных категорий выбрать категорию, наиболее точно выражающую характеристику сходства терминов.
4. Этап распознавания индивидуально обозначенной категории в памяти. Предъявляются 7 подходящих пар терминов и категории 5-ти разных видов. Среди категорий, сформированных экспертом, присутствует индивидуально обозначенная категория (категория получена на этапе 2). Обучаемый человек должен из предложенных категорий выбрать категорию, наиболее точно выражающую характеристику сходства терминов.
5. Этап воспроизведения парности в памяти. Предъявляется 7 подходящих терминов-стимулов. Обучаемый человек должен правильно воспроизвести термин-реакцию, в паре с которым термин-стимул использовался на предыдущих этапах.

Для выполнения эксперимента разработан программный продукт. Эксперимент проводился среди студентов разных курсов кафедры Компьютерных технологий. Результаты позволили выделить индивидуальные и общие свойства механизмов запоминания и воспроизведения студентов при изучении предметной области «язык программирования Borland Pascal».

Функциональная зависимость коэффициента сходства от уточняющих коэффициентов представляет первый уровень дерева влияющих факторов. Анализ фактора сходства, влияющего на процессы представления, распознавания и воспроизведения в памяти, был учтён в нечёткой модели GM при нечётком выводе коэффициента ассоциативной связности на следующем по иерархии уровне дерева.

Развитие работы связано с дальнейшим уточнением коэффициента сходства путём введения новых составляющих и выявления взаимосвязей между ними.

РЕЗЮМЕ

Для узагальненої моделі асоціативної пам'яті людини розроблено схему модифікації з урахуванням чітких та нечітких факторів, що впливають на параметри моделі. Проаналізовано вплив фактору «подібності» на відтворення в пам'яті спеціальної інформації. Побудовано комп'ютерний експеримент параметричної ідентифікації нечіткої моделі асоціативної пам'яті.

SUMMARY

The updating circuit for the generalized associative human memory model that takes into account precise and indistinct factors influencing parameters of the model was developed. The influence of «imilarity» factor on the reproduction of special information in the memory was analyzed. The computer experiment of parametrical identification for the indistinct associative memory model was constructed.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ezhov A.A., Nifanova A.V. Dan Ventura. Quantum associative memory with distributed queries. – Inf. Sci., 2000, 128(3-4), pp. 271-293. URL http://www.triniti.ru/CTF&VM/Articles/Ezhov2.pdf (4 мая 2007).
2. Mathematical Models of Human Memory. URL http://psy.uq.edu.au/CogPsych/Noetica/OpenForumIssue6 (2 октября 2006).
3. Хегенхан Б., Олсон М. Теории научения. – 6-е изд. – СПб.: Питер, 2004. – 474.: ил. – (Серия «Мастера психологии»).
4. Греченко Т.Н. Концепции памяти. URL http://www.logiston.ru/articles/general/concept_memory (12 июня 2004).
5. W.K. Estes, W. Todd Maddox. Risks of drawing inferences about cognitive processes from model fits to individuak versus average perfomance. – Psychonomic Belletin & Review, 2005, 12(3), pp. 403–408. URL http://www.homepage.psy.utexas.edu/homepage/Group/MaddoxLAB/Publications/p1129.pdf (1 июня 2005).
6. W.K. Estes. Traps in the route to models of memory and decision. - Psychonomic Belletin & Review, 2002, 9(1), pp. 3–25. URL http://www.psy.vanderbilt.edu/faculty/palmeri/P351-modeling/readings/Estes2002.pdf (1 марта 2002).

Надійшла до редакції 21.05.2007 р.

УДК 621.311.019.3

ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕОБХОДИМОСТИ РЕЗЕРВИРОВАНИЯ МИКРОПРОЦЕССОРНОЙ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ СИСТЕМОЙ ЭЛЕКТРОСНАБЖЕНИЯ ПРОМЫШЛЕННОГО ПРЕДПРИЯТИЯ

И.В.Жеженко, Ю.Л.Саенко, С.Л.Коровин,
Приазовский государственный технический университет

Перерывы в подаче электрической энергии потребителям нарушают производство, влекут за собой недовыработку продукции, брак производства, значительные убытки, а в ряде случаев – разрушение оборудования и опасность для жизни людей. Поэтому перерывы в электроснабжении должны быть по возможности исключены. Полная непрерывность подачи энергии необходима лишь в некоторых видах производства и для ограниченного числа приемников электроэнергии. Обеспечение этого требования связано со значительными затратами. Для подавляющего большинства приемников энергии допустимы перерывы в подаче энергии длительностью несколько секунд. В течении этого времени приемники электроэнергии или группы приемников могут быть автоматически переключены с поврежденной линии или трансформатора на резервные цепи. Во многих производствах могут быть допущены частичные перерывы в подаче энергии в течении длительного времени без ущерба для производства.

В [1] приводится классификация электроприемников в отношении обеспечения надежности электроснабжения. Электроприёмники разделяются на 3 категории. Для электроприемников 1 категории особой подгруппы необходимо 3 независимых источников питания, для 1 и 2 категории 2 независимых источника. Для 3 категории необходим 1 источник питания

В настоящее время осуществляется плавный переход систем управления системами электроснабжения на микропроцессорную основу[2-6], к тому же не существует обоснований необходимости резервирования систем управления для каждого источника электроэнергии в зависимости от категорийности электроприемников по надежности электроснабжения.

Целью данной работы является экономическое обоснование резервирования микропроцессорной системы управления СЭС промышленного предприятия для каждого независимого источника электроэнергии в зависимости от категорийности электроприемников по надежности электроснабжения.

1.1. Для электроприёмников 3 категории без резерва системы управления

Приведенные затраты микропроцессорной системы управления без резерва для электроприёмника 3 категории, в зависимости от произведения максимальной нагрузки Pm[КВТ], протекающей по элементу системы электроснабжения, и времени использования максимальной нагрузки Tm[час]:

$$Z1(PmTm) = 0.12 \cdot K + \frac{(Ak + Pk + Ok) \cdot K}{100} + Yo \cdot (Pa + Pp) \cdot PmTm, \qquad (1)$$

где: $Pa = 4.6 \cdot 10^{-4}$ - Вероятностная относительная длительность аварийного состояния микропроцессорной системы управления; $Pp = 1.3 \cdot 10^{-3}$ - Вероятностная относительная длительность планового ремонта микропроцессорной системы управления; K=7500- Стоимость микропроцессорной системы(Гривен); $Ak = 10$ – Отчисления на амортизацию микропроцессорной системы управления (%); $Pk = 1$ – Отчисления на ремонт микропроцессорной системы управления (%); $Ok = 10$ - Отчисления на обслуживание микропроцессорной системы управления (%); $Yo = 0.6$ - Удельный ущерб от недоотпуска электроэнергии (Гривен/КВТчас).

1.2. Для электроприёмников 3 категории с резервом системы управления

Приведенные затраты микропроцессорной системы управления с резервом для электроприёмника 3 категории, в зависимости от произведения максимальной нагрузки Pm[КВТ], протекающей по элементу системы электроснабжения, и времени использования максимальной нагрузки Tm[час]:

$$Z2(PmTm) = 0.12 \cdot K \cdot 2 + \frac{(Ak + Pk + Ok) \cdot K \cdot 2}{100} + Yo \cdot (2 \cdot Pa \cdot Pp + Pa^2) \cdot PmTm \qquad (2)$$

На рис. 1 приведены графики приведенных затрат системы управления: с резервом – сплошная линия, без резерва – пунктирная линия в зависимости от произведения максимальной нагрузки Pm[КВТ], протекающей по элементу системы электроснабжения и времени

© Жеженко И.В.,Саенко Ю.Л., Коровин С.Л.

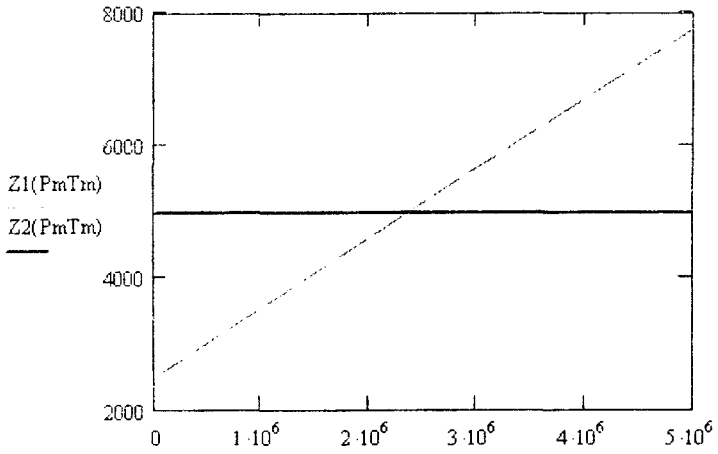


Рис. 1. Приведенные затраты систем управления Pm[КВТ]

использования максимальной нагрузки Tm[час].

Решив уравнение

$$Z1(PmTm) = Z2(PmTm) \qquad (3)$$

Найдем значение $PmTm0 = 2.346 \bullet 10^6$ при котором равнозначны оба варианта системы управления, если PmTm больше этого значения, то экономически выгодна микропроцессорная система управления с резервом для электроприёмника 3 категории.

Зависимость максимальной нагрузки, протекающей по элементу системыэлектроснабжения, от времени использования максимальной нагрузки Tm[час] при которых равнозначны оба варианта системы управления:

$$Pm(Tm) = \frac{PmTm}{Tm} \qquad (4)$$

На рис. 2 представлена кривая экономической целесообразности наличия резерва системы управления для электроприёмника 3 категории, в зависимости от максимальной нагрузки Pm[КВТ], протекающей по элементу системы электроснабжения, и времени использования максимальной нагрузки Tm[час]:

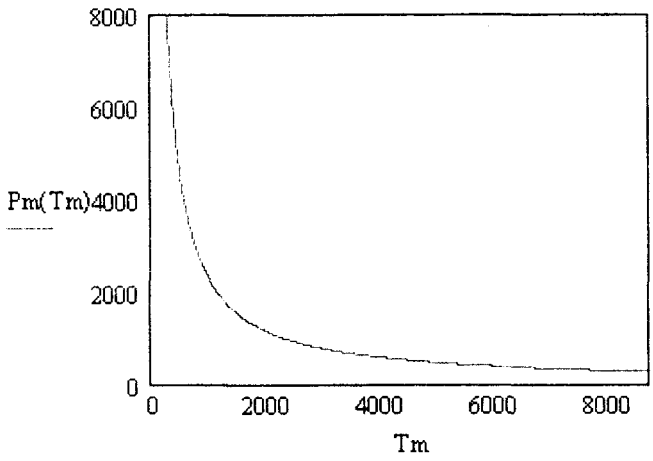


Рис. 2. Кривая экономической целесообразности наличия резерва системы управления для электроприёмника 3 категории

Если для данного электроприёмника 3 категории, по надежности электроснабжения, координата значения максимальной нагрузки Pm[КВТ] и времени использования максимальной нагрузки Tm [час] находится выше кривой, то экономически целесообразно применять резерв микропроцессорной системы управления элементом СЭС промышленного предприятия.

2. Структура управления для 2,1 категории электроприемников по надежности электроснабжения

2.1. Для электроприёмников 2,1 категории без резерва системы управления

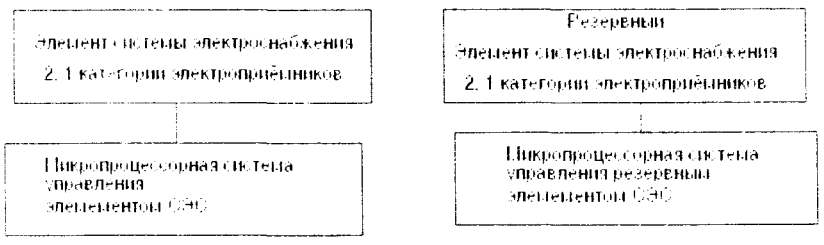


Рис. 3. Структурная схема управления элементом системы электроснабжения электроприёмника 2,1 категории без резерва системы управления

Приведенные затраты микропроцессорной системы управления без резерва системы управления для электроприёмника 2,1 категории, в зависимости от произведения максимальной нагрузки Pm[КВТ], протекающей по элементу системы электроснабжения и времени использования максимальной нагрузки Tm[час]:

$$Z3(PmTm) = 0.12 \cdot K + \frac{(Ak + Pk + Ok) \cdot K}{100} + Yo \cdot [2 \cdot (Pac + Pa) \cdot (Ppc + Pp) + (Pac + Pa)^2] \cdot PmTm \qquad (5)$$

2.2. Для электроприёмников 2,1 категории с 1 резервом системы управления

Приведенные затраты микропроцессорной системы управления с 1 резервом для электроприёмника 1,2 категории:

$$Z4(PmTm) = 0.12 \cdot K \cdot 1.5 + \frac{(Ak + Pk + Ok) \cdot K \cdot 1.5}{100} + Yo[(Pac + Pa) \cdot (Ppc + Pp \cdot Pa) +$$

$$+ (Pac + Pa^2 + PpPa) \cdot (Ppc + Pp) + (Pac + Pa) \cdot (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa)] \cdot PmTm$$

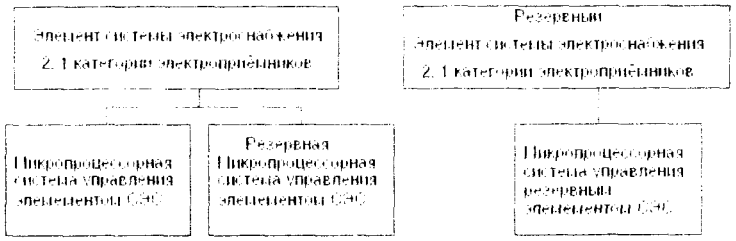


Рис. 4. Структурная схема управления элементом системы электроснабжения электроприёмника 2,1 категории с 1 резервом системы управления

2.3. Для электроприёмников 2,1 категории с резервом системы управления

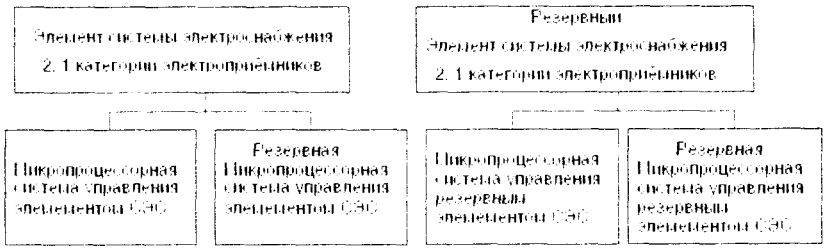


Рис. 5. Структурная схема управления элементом системы электроснабжения электроприёмника 2,1 категории с резервом системы управления

Приведенные затраты микропроцессорной системы управления с резервом для электроприёмника 1,2 категории:

$$Z5(PmTm = 0.12 \cdot K \cdot 2 + \frac{(Ak + Pk + Ok) \cdot K \cdot 2}{100} + Yo[2 \cdot (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa) \cdot (Ppc + Pp \cdot Pa) +$$

$$+ (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa)^2] \cdot PmTm \qquad (7)$$

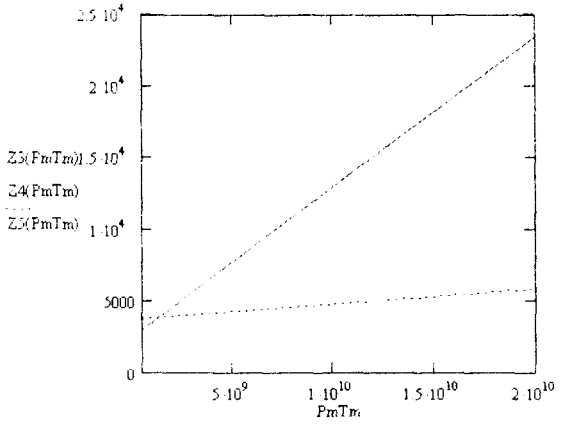


Рис. 6. Приведенные затраты систем управления

На рисунке 6 приведены графики приведенных затрат (гривен/год)системы управления: с 2 резервами – Z5 , одним резервом – Z4, без резерва Z3, в зависимости от произведения максимальной нагрузки Pm [КВТ], протекающей по элементу системы электроснабжения и времени использования максимальной нагрузки Tm [час].

Решив уравнения

$$Z3(PmTm) = Z4(PmTm)$$
$$Z4(PmTm) = Z5(PmTm) \qquad (8)$$

Найдем значение $PmTm0 = 1.314 \bullet 10^9$, при котором равнозначны варианты 2.1 и 2.2 систем управления; $PmTm1 = 1{,}247 \bullet 10^{10}$, при котором равнозначны варианты 2.2 и 2.3 систем управления.

Зависимость максимальной нагрузки

Pm[КВТ], протекающей по элементу системы электроснабжения от времени использования максимальной нагрузки, Tm[час] при которых равнозначны варианты 2.1 и 2.2 системы управления:

$$Pm(Tm) = \frac{PmTm0}{Tm} \tag{9}$$

Зависимость максимальной нагрузки Pm, протекающей по элементу системы электроснабжения, от времени использования максимальной нагрузки Tm, при которых равнозначны варианты 2.2 и 2.3 системы управления:

$$Pm1 = \frac{PmTm1}{Tm} \tag{10}$$

На рисунке 7 представлены кривые экономической целесообразности наличия резерва системы управления для электроприёмника 1,2 категории $Pm(Tm)$, $Pm1(Tm)$, в зависимости от максимальной нагрузки Pm[КВТ], протекающей по питающему трансформатору и распределительному устройству, и времени использования максимальной нагрузки Tm[час]:

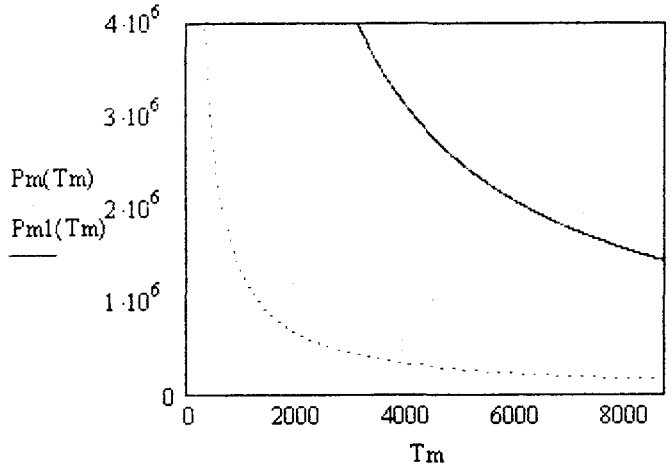


Рис. 7. Кривые экономической целесообразности наличия резерва системы управления для электроприёмника 1,2 категории

Если для данного электроприёмника, 1,2 категории по надежности электроснабжения, координата значения максимальной нагрузки Pm [КВТ] и времени использования максимальной нагрузки Tm [час] находится выше сплошной кривой, то экономически целесообразно применять резерв системы управления на каждом питающем трансформаторе и распределительном устройстве системы электроснабжения (основном и резервном); если между пунктирной и сплошной кривой, то целесообразен резерв системы управления для основного трансформатора и распределительного устройства системы электроснабжения; если ниже пунктирной кривой, то нет целесообразности резервирования системы управления .

3. Структура управления для 1 категории электроприемников по надежности электроснабжения, особой подгруппы

3.1. Для электроприёмников без резерва системы управления

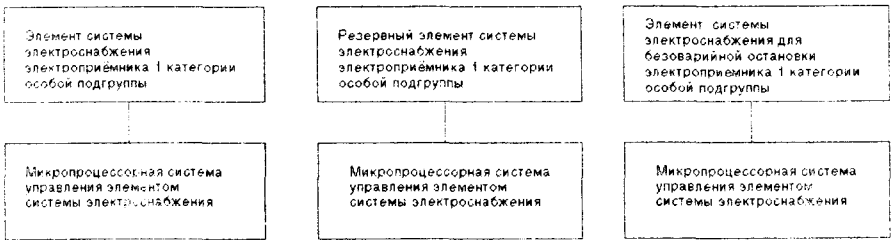


Рис. 8. Структурная схема управления элементом системы электроснабжения электроприёмника 1 категории особой подгруппы, без резерва системы управления

Приведенные затраты данной микропроцессорной системы управления в зависимости от произведения максимальной нагрузки Pm[КВТ], протекающей по элементу системы электроснабжения, и времени использования максимальной нагрузки Tm[час]:

$$Z1(PmTm) = 0.12 \cdot K + \frac{(Ak + Pk + Ok) \cdot K}{100} + Yo[2 \cdot (Pac + Pa) \cdot (Ppc + Pp) + (Pac + Pa)^2] \cdot PmTm + [3 \cdot (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa)^2 \cdot (Ppc + Pp \cdot Pa) + (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa)^3] \cdot Co \cdot PmTm \tag{11}$$

где: $Co = 0.4$ – Средняя стоимость поврежденного оборудования в результате перебоя электроснабжения, отнесенная к потребляемой энергии за год (гривен/(КВТ*ч)).

3.2. Для электроприёмников 1 категории особой подгруппы с 1 резервом системы управления СЭС

Приведенные данной микропроцессорной системы управления:

$$Z2(PmTm) = 0.12 \cdot K \cdot 1.33 + \frac{(Ak + Pk + Ok) \cdot K \cdot 1.33}{100} + Yo[(Pac + Pa) \cdot (Ppc + Pp \cdot Pa) +$$

$$+(Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa) \cdot (Ppc + Pp) + (Pac + Pa) \cdot (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa)] \cdot PmTm + \quad (12)$$

$$+[3 \cdot (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa) \cdot (Ppc + Pp) + (Pac \cdot + Pa) \cdot (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa)] \cdot Co \cdot PmTm$$

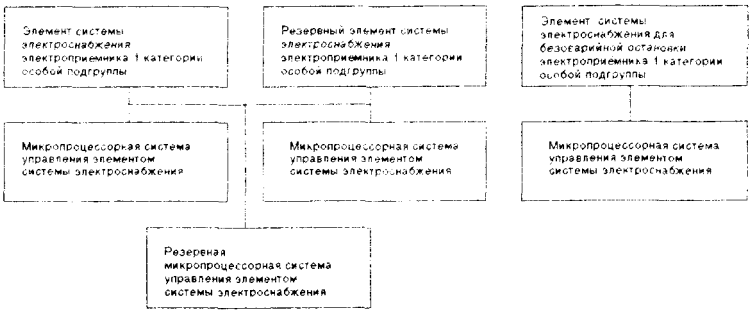


Рис. 9. Структурная схема управления элементом системы электроснабжения электроприёмника 1 категории особой подгруппы с 1 резервом системы управления

3.3. Для электроприёмников 1 категории особой подгруппы с 1 резервом системы управления СЭС и резервом системы управления для элемента безаварийной остановки

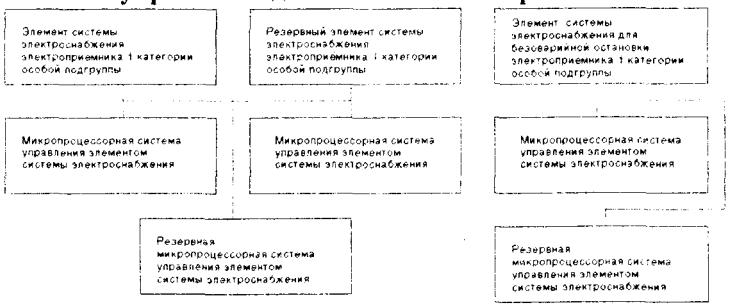


Рис. 10. Структурная схема управления элементом системы электроснабжения электроприёмника 1 категории с 1 резервом системы управления СЭС и резервом системы управления для элемента безаварийной остановки

Приведенные затраты данной микропроцессорной системы:

$$Z3(PmTm) = 0.12 \cdot K \cdot 1.66 + \frac{(Ak + Pk + Ok) \cdot K \cdot 1.66}{100} + Yo \cdot [(Pac + Pa) \cdot (Ppc + Pp \cdot Pa) +$$

$$+(Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa) \cdot (Ppc + Pp) + (Pac + Pa) \cdot (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa)] + [2 \cdot (Pac + Pa) \cdot \quad (13)$$

$$\cdot (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa) \cdot (Ppc + Pp \cdot Pa) + (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa)^2 \cdot (Ppc + Pp) +$$

$$+(Pac + Pa) \cdot (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa)^2] \cdot Co \cdot PmTm$$

3.4. Для электроприёмников 1 категории особой подгруппы с 2 резервами системы управления СЭС и без резерва системы управления для элемента безаварийной остановки

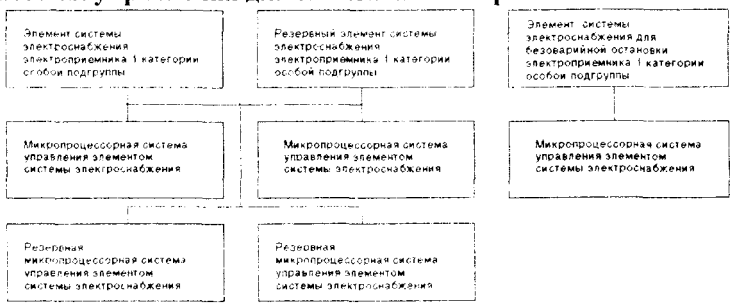


Рис. 11. Структурная схема управления элементом системы электроснабжения электроприёмника 1 категории особой подгруппы, с 2 резервами системы управления СЭС и без резерва системы управления для элемента безаварийной остановки

Приведенные затраты данной микропроцессорной системы управления:

$$Z4(PmTm) = 0.12 \cdot K \cdot 1.66 + \frac{(Ak + Pk + Ok) \cdot K \cdot 1.66}{100} + Yo \cdot [2 \cdot (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa) \cdot$$
$$\cdot (Ppc + Pp \cdot Pa) + (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa)^2] \cdot PmTm + [2 \cdot (Pac + Pa) \cdot \quad (14)$$
$$\cdot (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa) \cdot (Ppc + Pp \cdot Pa) + (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa)^2 + (Ppc + Pp) +$$
$$+ (Pac + Pa) \cdot (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa)^2] \cdot Co \cdot PmTm$$

3.5. Для электроприёмников 1 категории особой подгруппы с полным резервом системы управления СЭС

Приведенные затраты данной микропроцессорной системы управления:

$$Z5(PmTm) = 0.12 \cdot K \cdot 2 + \frac{(Ak + Pk + Ok) \cdot K \cdot 2}{100} + Yo \cdot [2 \cdot (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa) \cdot$$
$$\cdot (Ppc + Pp \cdot Pa) + (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa)^2] \cdot PmTm \quad (15)$$
$$+ [3 \cdot (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa)^2 \cdot (Ppc + Pp \cdot Pa) +$$
$$+ (Pac + Pa^2 + Pp \cdot Pa)^3] \cdot Co \cdot PmTm$$

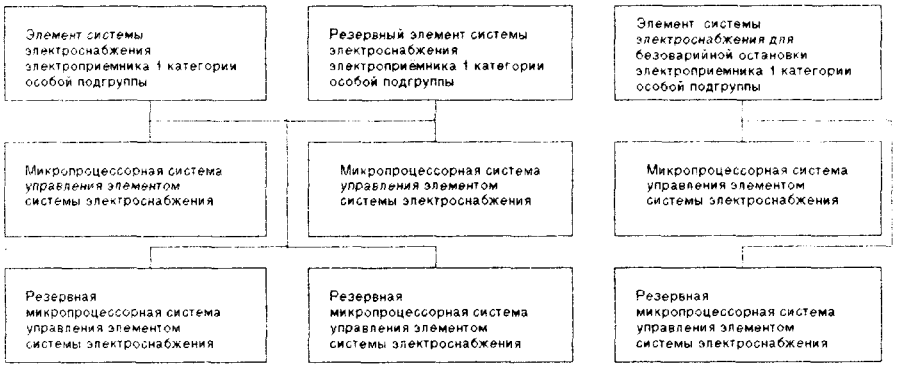
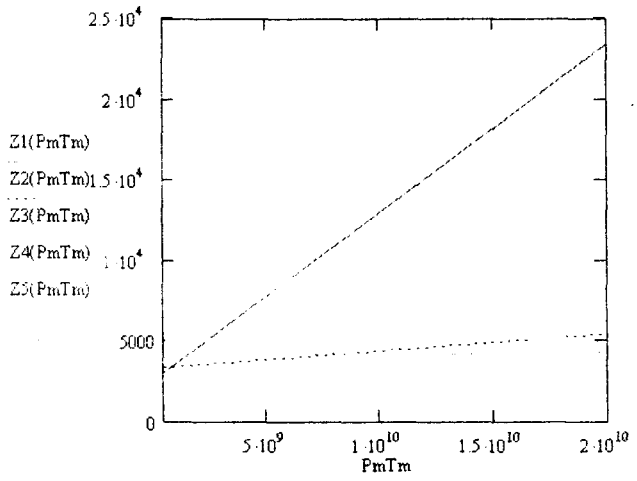


Рис. 12. Структурная схема управления с полным резервом системы управления для электроприемника 1 категории особой подгруппы

На рисунке 13 приведены графики приведенных затрат (гривен/год)системы управления, в зависимости от произведения максимальной нагрузки Pm [КВТ], протекающей по элементу системы электроснабжения и времени использования максимальной нагрузки Tm [час] для электроприемника 1 категории особой подгруппы.



Решив уравнения

$$Z1(PmTm) = Z2(PmTm)$$
$$Z2(PmTm) = Z4(PmTm) \quad (16)$$

Найдем значение $PmTm0 = 8,673 \bullet 10^8$, при котором равнозначны варианты 3.1 и 3.2 систем управления; $PmTm1 = 8,23 \bullet 10^9$, при котором равнозначны варианты 3.2 и 3.4 систем управления.

Зависимость максимальной нагрузки Pm[КВТ], протекающей по элементу системы электроснабжения, от времени использования максимальной нагрузки

Рис. 13. Приведенные затраты систем управления Tm[час], при которых равнозначны варианты 3.1 и 3.2 системы управления:

$$Pm(Tm) = \frac{PmTm0}{Tm} \quad (17)$$

Зависимость максимальной нагрузки Pm, протекающей по элементу системы электроснабжения, от времени использования максимальной нагрузки Tm, при которых равнозначны варианты 3.2 и 3.4 системы управления:

$$Pm1(Tm) = \frac{PmTm1}{Tm} \qquad (18)$$

На рисунке 14 представлены кривые экономической целесообразности наличия резерва системы управления для электроприёмника 1 категории особой подгруппы $Pm(Tm)$, $Pm1(Tm)$, в зависимости от максимальной нагрузки Pm[КВТ], протекающей по питающему трансформатору и распределительному устройству системы электроснабжения, и времени использования максимальной нагрузки Tm[час]:

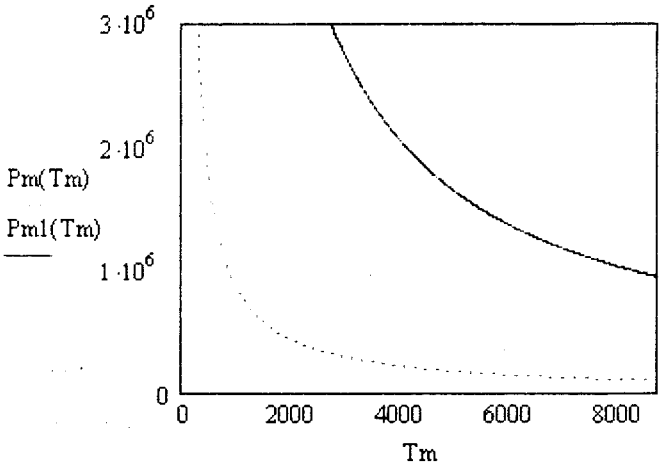


Рис. 14. Кривые экономической целесообразности наличия резерва системы управления для электроприёмника 1 категории особой подгруппы

Если для данного электроприёмника, 1 категории особой подгруппы по надежности электроснабжения, координата значения максимальной нагрузки Pm [КВТ] и времени использования максимальной нагрузки Tm [час] находится выше сплошной кривой, то экономически целесообразно применять резерв системы управления на основном и резервном питающем трансформаторе и распределительном устройстве системы электроснабжения, без резерва системы управления для элементов СЭС безаварийной остановки; если между пунктирной и сплошной кривой, то целесообразен резерв системы управления основного питающего трансформатора и распределительного устройства системы электроснабжения, без резерва системы управления для элементов СЭС безаварийной остановки; если ниже пунктирной кривой, то нет целесообразности резервирования системы управления.

Перспективой дальнейшего исследования в данной области является обоснование централизации или децентрализации вычислительных процессов микропроцессорной системы управления СЭС промышленного предприятия. Под централизацией понимается сбор всей информации с каждого силового элемента СЭС и обработка их центральным процессором всей СЭС промышленного предприятия. Под децентрализацией понимается наличие у каждого силового элемента СЭС своей системы управления, связанной в единое целое с другими системами управления.

Выводы

Если учесть, что среднее значение времени максимальной нагрузки Tm составляет 5000 часов, то можно сделать выводы:

Для электроприемников электроэнергии 3 категории по надежности электроснабжения необходимо резервировать микропроцессорную систему управления при значении максимальной нагрузки Pm большей 500 КВТ.

При проектировании системы электроснабжения промышленного предприятия, в состав которого входят потребители 1,2 категории по надежности электроснабжения нет необходимости резервировать компьютерную систему управления , при значении максимальной нагрузки Pm меньшей 262 МВТ (внутреннее электроснабжение промышленного предприятия); необходимо резервировать компьютерную систему управления только для рабочего силового трансформатора и распределительного устройства при значении максимальной нагрузки Pm большем 262 МВТ (внешнее электроснабжение промышленного предприятия).

При проектировании системы электроснабжения промышленного предприятия, в состав которого входят потребители 1 категории особой подгруппы по надежности электроснабжения нет необходимости резервировать компьютерную систему управления при значении максимальной нагрузки Pm меньшей 173 МВТ (внутреннее электроснабжение промышленного предприятия); необходимо резервировать компьютерную систему управления только для основного силового питающего трансформатора и распределительного устройства при значении максимальной нагрузки Pm большем 173 МВТ (внешнее электроснабжение промышленного предприятия).

Приведено экономическое обоснование необходимости резервирования микропроцессорной системы управления системой электроснабжения промышленного предприятия для каждого независимого источника электроэнергии в зависимости от категорийности электроприемников по надежности электроснабжения.

РЕЗЮМЕ

Приведено економічне обгрунтування необхідності резервування мікропроцесорної системи керування системою електропостачання промислового підприємства для кожного незалежного джерела електроенергії в залежності від категорийности электроприемников по надійності електропостачання.

SUMMARY

The economics substantiation of microprocessor system management reservation necessity is given. The microprocessor systems regarded for every independent source of electrical energy of industrial plant power supply. The substantiation depends on electric receiver flatness of power supply reliability.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Правила устройства электроустановок / М.: Энергоатомиздат, 1986. – 648 с.
2. Автоматика 97 – Украинская конференция по автоматическому управлению. Черкассы, 1997. Т5.
3. Жежеленко И.В. Реактивная мощность в системах электроснабжения / И.В.Жежеленко, Ю.Л.Саенко. – М.: Энергоатомиздат, 1989. – 226 с.
4. Энергосбережение. – М., 2002. – №1. – С.17-24.
5. Горюнов И.Т. Основные принципы построения системы контроля, анализа и управления качеством электроэнергии / И.Т.Горюнов, В.С.Мозгалев, Е.В.Дубинский // Электрические станции, 1998. – №12. – С.15-17.
6. Куропаткин П.В. Теория автоматического управлерия / П.В.Куропаткин. – М.: Энергия, 1973. – 345 с.
7. Управление режимами работы объектов электрических систем. Тезисы докладов 2 Международной научно-технической конференции. Донецкий Национальный Технический Университет 2002 г.
8. Заболотный И.П. Информационно – управляющие системы для локальных электроэнергетических объектов на основании современных информационных технологий. Автореферат. 2005 г.

Надійшла до редакції 27.11.2007 р.

УДК 621.43:621.8.035.004.18

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ АСУ ПРОЦЕССОМ ОБСЛУЖИВАНИЯ ЗАКРЫТЫХ ПАРКОВ ТРАНСПОРТНЫХ МАШИН

В.А.Лахно,
Луганский национальный аграрный университет, г. Луганск, Украина

ОБЩАЯ ПОСТАНОВКА ПРОБЛЕМЫ. Метод статистического моделирования может применяться для решения различных инженерных и экономических задач [1-3]. Так, например, он может применяться для оптимальной организации процесса обслуживания закрытых парков машин, т.е. парков тракторов, различных грузовых и легковых автомобилей, используемых для грузовых и пассажирских перевозок. В этих условиях ставится задача по определению оптимального количества обслуживающего персонала, при котором машины не будут простаивать в очереди в ожидании ремонта, а обслуживающий персонал не будет простаивать без работы в ожидании вызова.

Указанная задача является одной из задач теории массового обслуживания. Критерием эффективности функционирования подобных систем является экономический критерий – себестоимость продукции. При этом под продукцией понимают тонно-километры пробега машин, или число часов, в течение которых машины находятся в исправном состоянии и выполняют свое основное назначение. Очевидно, что по мере увеличения числа обслуживающих ремонтных бригад время простоя машин парка в ожидании ремонта будет уменьшаться, и значит, будет уменьшаться убыток от простоя. С другой стороны, стоимость содержания ремонтных бригад будет при этом возрастать. Суммарная стоимость продукции, обусловливаемая убытком от простоя парка машин и стоимостью на содержание ремонтных бригад, является суммой указанных двух факторов.

АНАЛИЗ ПОСЛЕДНИХ ИССЛЕДОВАНИЙ И ПУБЛИКАЦИЙ. В связи с тем, что в большинстве случаев рассматриваемый процесс организации обслуживания парка машин не является Марковским, для его решения применяется метод статистического моделирования. Рассмотрим порядок решения подобных задач.

Существующие системы управления грузовыми перевозками (СУГП) должны обеспечить прогнозирование спроса на перевозки, оптимальное планирование перевозок, рациональную организацию работы подвижного состава, диспетчерское руководство работой, объективный анализ уровня обслуживания. Детерминированные модели математического программирования часто оказываются неадекватными реальным процессам перевозки грузов. Это объясняется, прежде всего, неточностью и вероятностным характером тех показаний и ограничений, которые вкладываются в модели работы перевозчиков. Планирование на основе наиболее оптимистических прогнозов, факторов, обусловливающих производство и потребление, зачастую оказывается несостоятельным из-за отсутствия резервов для коррекции неувязок, которые возникают, если какое-либо звено в цепи производства дает меньше, чем ожидалось по оптимистичному прогнозу. Намного целесообразнее планировать по усредненным показателям, если их разброс достаточно велик [3].

ФОРМИРОВАНИЕ ЦЕЛИ ИССЛЕДОВАНИЯ. Для решения задач планирования в условиях неопределенности рассматривается возможность дополнения математической модели СУГП путем стохастического моделирования.

Основной материал исследования составляет парк дорожно-строительных машин в количестве S = N машин (например, N =10). Для его обслуживания содержится $Ч$ ремонтных бригад, в каждой из которых может быть по несколько слесарей. Требуется найти оптимальный вариант числа ремонтных бригад, при котором себестоимость единицы продукции будет наименьшей.

Критерий эффективности или целевая функция в рассматриваемой задаче, представляет собой себестоимость единицы продукции, есть функция многих случайных аргументов, рассчитываемая по формуле (1).

$$W = \varphi(Ч; M; N...), \qquad (1)$$

где $Ч$ – количество ремонтных бригад, обслуживающих парк машин;
M – зарплата одной бригады;
N – количество слесарей в ремонтной бригаде.

В АСУ (СУГП) моделируется время, расходуемое одной ремонтной бригадой для ремонта одной машины, и время между двумя очередными требованиями на ремонт. Для этого необходимо знать законы, по которым распределены эти случайные величины.

Для определения законов распределения последовательно выполняют следующие действия.

© Лахно В.А.

В течение одного-двух месяцев проводят статистические наблюдения и фиксируют промежутки времени между двумя очередными вызовами ремонтной бригады для ремонта машин парка.

Полученные данные группируют по длительности в несколько разрядов, например, в 8-16 разрядов, и вычисляют поразрядные опытные частости промежутков времени между двумя очередными требованиями на ремонт, для чего поразрядные частоты делят на число всех требований по формуле (2).

$$P_{i\,выз.} = \frac{m^{*}_{i\,выз.}}{N}, \qquad (2)$$

где $m^{*}_{i\,выз.}$ – поразрядные частоты вызовов ремонтных бригад;

N – общее число вызовов, т.е. объем выборки.

На основе этого строят поразрядную гистограмму распределения частостей промежутков времени между двумя очередными вызовами.

Аналогичными наблюдениями фиксируют промежутки времени расходуемого ремонтными бригадами для ремонта машин парка.

Поразрядные частости продолжительности ремонта вычисляют по формуле (3).

$$P_{i\,рем.} = \frac{m^{*}_{i\,рем.}}{N}, \qquad (3)$$

где $m^{*}_{i\,рем.}$ – поразрядные частоты длительности обслуживания, т.е. ремонта;

N – число всех ремонтов (объем выборки).

Предположим, что в результате обработки опытных данных было установлено:

– что промежутки времени между двумя очередными вызовами ремонтной бригады; $t_{i выз}$ распределены по закону Эрланга с параметром m;

– время обслуживания одной машины $t_{i обсл.}$ распределено по закону Вейбулла с параметрами n, μ, L_0.

Для получения более полной информации может быть произведено хронометрирование времени обслуживания машин при различном количестве слесарей N в ремонтных бригадах, например, если в бригадах имеется по два, три, четыре и больше слесарей. Полученные данные фиксируются.

Для более детального исследования могут быть построены гистограммы отдельно для каждой ремонтной бригады. При этом может оказаться, что для различных ремонтных бригад имеют место различные вероятностные законы.

Все эти особенности легко учитываются при решении задачи методом статистического моделирования и вызывают значительные трудности при решении задачи аналитическим способом.

Теперь вычислим коэффициент использования парка машин, который равен отношению числа исправно работающих машин к их общему количеству. Для этого предварительно определим вероятности состояний парка машин.

Например, вероятность того, что все машины будут исправными, (и значит, все ремонтные бригады будут свободными) равна отношению рабочего времени дня, в течение которого все машины были исправными на полное время рабочего дня, что представлено в формуле (4)

$$P(0) = \frac{\sum T_{испр.}}{T_{полн.}}. \qquad (4)$$

Аналогично определяются вероятности других состояний системы.

Подобным образом вычисляются вероятности остальных состояний системы, см. формулы (5), (6) и (7).

$$P(2) = \frac{\sum T_{s-2}}{T_{полн.}} \qquad (5)$$

$$P(3) = \frac{\sum T_{s-3}}{T_{полн.}} \qquad (6)$$

$$P(k) = \frac{\sum T_{s-k}}{T_{полн.}} \qquad (7)$$

Число реализаций берут достаточно большим, после чего результаты усредняются.

Предположим, что при числе ремонтных бригад $Ч$=3, в каждой из которых было по два слесаря, были получены следующие вероятности состояний системы:

$P(0)=0{,}04$; $P(1)=0{,}12$; $P(2)=0{,}16$; $P(3)=0{,}18$; $P(4)=0{,}16$ ... $P(10)=0{,}01$.

Вычисленные значения вероятностей состояния системы при заданном количестве ремонтных бригад $Ч$ и заданном количестве слесарей в каждой из бригад позволяют найти числовые характеристики функционирования системы, а именно математическое ожидание числа требований находящихся в системе (в обслуживании и его ожидании), по формуле (8).

$$M(K)=\sum K\cdot P_K=0\cdot P_0+1\cdot P_1+2\cdot P_2+3\cdot P_3+\ldots \qquad (8)$$

где K – частные значения числа машин ожидающих ремонта и ремонтирующихся, т.е. число неисправных машин; P_K – вероятности, отвечающие этим частным значениям K .

Для рассматриваемого в качестве иллюстрации примера, получаем:

$$M(K)=0\cdot 0{,}04+1\cdot 0{,}12+2\cdot 0{,}16+3\cdot 0{,}8+\ldots+10\cdot 0{,}01=3{,}98\ \textit{машин.}$$

Коэффициент простоя парка машин, равный отношению числа машин ожидающих очереди и ремонтируемых к числу всех машин парка, вычисляется по формуле (9).

$$u=\frac{M(k)}{S} \qquad (9)$$

Для рассматриваемого примера, получаем:

$$u=\frac{3{,}98}{10}=0{,}398\approx 0{,}4\ \textit{машины.}$$

Коэффициент использования парка машин u равен отношению числа исправно работающих машин к их суммарному значению и определяется по формуле (10).

$$\bar{u}=1-u=\frac{S-M(k)}{S} \qquad (10)$$

Для рассматриваемого примера, получаем:

$$u=\frac{20-3{,}98}{10}=0{,}6.$$

Дополнительно могут быть вычислено, например, математическое ожидание длины очереди, т.е. среднее число машин ожидающих обслуживания по формуле (11).

$$M(L)=\sum L_i\cdot P_{Ч+1}=\sum (K-Ч)\cdot P_{Ч+1}, \qquad (11)$$

где K – число неисправных машин; $Ч$ – число ремонтных бригад; $K-Ч$ – случайное число машин ожидающих в очереди; $P_{Ч+1}$ – вероятности, отвечающие частным значениям числа машин ожидающих в очереди.

Например, если число ремонтных бригад $Ч$=3, то очередь возникает только тогда, когда система будет находиться в состоянии $P_4, P_5, \ldots, P_{10}$.

Поэтому для рассматриваемого примера, получаем:

$$M(L)=(4-3)\cdot P_4+(5-3)\cdot P_5+(6-3)\cdot P_6+\ldots(10-3)\cdot P_{10}=$$
$$=1\cdot 0{,}16+2\cdot 0{,}12+3\cdot 0{,}10+\ldots+7\cdot 0{,}01\cong 3\ \textit{машины.}$$

Математическое ожидание числа незанятых ремонтных бригад вычисляется по формуле (12).

$$M(\bar{Ч})=\sum \bar{Ч}\cdot P_K=\sum (Ч-K)\cdot P_K \qquad (12)$$

Если число ремонтных бригад равно трем, тогда для рассматриваемого примера, получаем:

$$M(\bar{Ч})=(3-0)\cdot P(0)+(3-1)\cdot P(1)+(3-2)\cdot P(2)=3\cdot 0{,}04+2\cdot 0{,}12+1\cdot 0{,}16=0{,}52.$$

Полученные значения коэффициента простоя u и коэффициента использования парка машин $\bar{u}$ позволяют приступить к экономической оценке различных вариантов организации процесса обслуживания, и выбору оптимального варианта.

Себестоимость единицы продукции W, как известно, равна отношению суммарных затрат производства $З$ к объему выпускаемой продукции B. Суммарные затраты производства можно приближенно разделить на две составляющие: постоянные $\hat{К}$ и переменные затраты $П$. Таким образом, можно записать формулу (13).

$$W=\frac{З}{B}=\frac{\hat{K}+П}{B}, \qquad (13)$$

где $\hat{K}$ – условно постоянные затраты, величина которых складывается из стоимости помещения, его ремонта, расходов на отопление, освещение, расходов на содержание ИТР, охраны и т.п.; $П$ – переменные затраты, вели-

чина которых обусловливается расходом сырья, смазочных материалов, расходом электроэнергии, расходом запасных частей для ремонта машин и зарплаты для штата ремонтных бригад и т.п.

Если рассматривать объем выпускаемой продукции, отвечающей двум различным организациям процесса обслуживания, то можно составить следующую пропорцию, см. формулу (14).

$$\frac{B}{B_0} = \frac{u}{u_0} \quad \text{или} \quad B = B_0 \frac{1-u}{1-u_0}. \tag{14}$$

где B_0 – объем продукции, отвечающей числу ремонтных бригад $Ч_0$; B – объем продукции, отвечающей числу ремонтных бригад.

Переменные затраты $П$ связаны с коэффициентом использования парка машин той же пропорцией, что для объема продукции, т.е. получаем формулу (15).

$$\frac{П}{П_0} = \frac{u}{u_0} \quad \text{или} \quad П = П_0 \frac{1-u}{1-u_0}. \tag{15}$$

Постоянные затраты $\hat{K}$ связаны с числом ремонтных бригад соотношением, выраженным в формуле (16).

$$\hat{K} = \hat{K}_0 + \Delta\hat{K} = \hat{K}_0 + M(r - r_0), \tag{16}$$

где $\hat{K}$ – постоянные затраты при заданном числе ремонтных бригад $Ч$; $\Delta\hat{K}$ – приращение расходов, обуславливаемое изменением числа ремонтных бригад; M – зарплата приходящееся для одной ремонтной бригады; $Ч$ – число ремонтных бригад.

Подставляя значения B, $П$ и $\hat{K}$ формулу себестоимости получаем:

$$C = \frac{З}{B} = \frac{П + \hat{K}}{B} = \frac{П_0\left(\frac{1-u}{1-u_0}\right) + \hat{K}_0 + M \cdot (Ч - Ч_0)}{B_0\left(\frac{1-u}{1-u_0}\right)}$$

или окончательно:

$$C = \frac{П_0}{B_0} + \frac{[\hat{K}_0 + M \cdot (Ч - Ч_0)] \cdot (1-u_0)}{B_0 \cdot (1-u_0)}.$$

ВЫВОДЫ И ПРЕДЛОЖЕНИЯ. Полученная формула устанавливает зависимость себестоимости единицы продукции от числа ремонтных бригад, и, следовательно, позволяет найти оптимальный вариант организации процесса обслуживания парка транспортных машин. Если задаться величиной доверительной вероятности P_0, то может быть вычислена оптимистическая и пессимистическая составляющие прогнозирования рассматриваемого явления. Основным критерием выбора оптимального количества ремонтных бригад послужил экономический критерий – себестоимость единицы продукции, величина которого вычислялась с помощью коэффициента использования парка машин и количества ремонтных бригад. Разработанная математическая модель может использоваться в АСУ процессом обслуживания закрытых парков транспортных машин.

РЕЗЮМЕ

Обґрунтована необхідність доповнення математичних моделей АСУ перевезеннями та обслуговуванням транспортних машин, шляхом застосування стохастичного підходу. Показано вплив виявлених чинників на основний критерій доцільності АСУ – економічну ефективність.

SUMMARY

The necessity of addition of mathematical models transporting transportations, by application of stochastic approach. Influencing of the exposed factors on the basic criterion of expedience is shown – economic efficiency.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Елизаров В.А., Львин М.Е., Сахаров В.П. Автоматизированные системы управления на автомобильном транспорте. – М.: Транспорт, 1983. – 144 с.
2. Завадский А.С. Моделирование случайных процессов. – М.: МАДИ, 1972. – 104 с.
3. Кузнецов Е.С., Болдин А.П., Власов В.М. Техническая эксплуатация автомобилей. – М.: Наука, 2001. – 535 с.

Надійшла до редакції 17.10.2007 р.

УДК 681.3.068

ВЫБОР ИЗ СЕРИИ ФОТОГРАФИЙ ИЗОБРАЖЕНИЯ, НАИБОЛЕЕ ПРИБЛИЖЕННОГО К ФРОНТАЛЬНОМУ ВИДУ

А.А.Каргин, Е.Е.Пятикоп,*
**Приазовский государственный технический университет*

Введение.

Проблема распознавания человеческого лица в непрерывном видео потоке является одной из важнейших задач искусственного интеллекта. Решение этой задачи позволит создавать системы автоматического видеонаблюдения с возможностью идентификации личности. Область применения таких систем широкая: начиная от небольших фирм и банкоматов (для охранных целей) и заканчивая крупнейшими аэропортами (как средство борьбы с терроризмом).

Разработано большое количество методов распознавания лица человека на изображении. [1] Они основаны на статическом изображении лица человека. В видео потоке лицо человека находится в движении, каждый промежуток времени его положение меняется: меняется поворот головы, наклон вправо или влево, вперед или назад.

От положения головы существенно зависит эффективность решения задачи идентификации. Поэтому существующие методы распознавания чаще всего используют фронтальное изображение лица человека.

Один из подходов к решению задачи идентификации личности по данным видео потока состоит в этапах:

1.Обнаружение и локализация на серии фотографий головы человека.

2.Определение характерных точек лица.

3.Отбор фотографии с изображением наиболее приближенным к фронтальному виду.

4.Сопоставление с эталонным фото.

В данной статье рассматривается третья фаза решения задачи – выбора изображения с лицом человека в фас из серии фотографий.

Анализ литературных источников показал, что существуют и активно используются различные подходы к оценке ракурса головы человека на изображении. В основном ставятся задачи определения углов ориентации лица. Так в работе [2] представлен метод, основанный на преобразовании, родственном преобразованию Хафа, который позволяет определять угол крена головы. В [3] рассматривается задача автоматического определения углов наклонов лица человека на изображения и предложены закономерности взаимного расположения характерных деталей лица при боковых и прямых наклонах головы. В статье [4] предлагается метод обнаружения лиц с боковым поворотом, использующий базис собственных лиц и классификатор лицо-фон, а также предварительную обработку входных изображений с помощью интегральных проекций. Эти методы применяются для оценки различных параметров ракурса головы на одной конкретной фотографии, при этом фото не рассматривается в группе.

В данной публикации предложен метод выбора из набора фотографий изображения лица человека, которое наиболее приближено к фронтальному виду, основанный на характерных точках лица.

Постановка задачи

Задача отбора фронтального фото из серии фотографий ставится следующим образом. Пусть имеется набор N фотографий с изображением лица человека в разных ракурсах. В этот набор входит как минимум одна фотография с фронтальным изображением лица, т. е. эталонная. Остальные фотографии набора отличаются от эталонной изменением положения головы.

Тогда каждая фотография из серии описывается координатами характерных точек p_i , где $i \in 1...n$, n – количество характерных точек. Координаты точек должны быть предварительно определены автоматически каким-либо методом [5-7]. Точки должны отображать изменение положения головы человека на изображении.

В качестве меры близости конкретной фотографии к эталонной выбрана функция принадлежности M_j где $j \in 1...N$, N – количество фотографий . Эта функция определяется на основе информации о характерных точках.

Задача ставится упорядочить множество фотографий из этой серии по критерию M_j

Величина принадлежности M_j, будет показывать насколько данное фото близко к фронтальному изображению.

Голова на фотографии может иметь различный ракурс, поэтому предварительно необходимо классифицировать положения головы человека на фото. Условно различные положения головы можно разбить 4 группы:

1. *Боковые наклоны головы* или *наклоны вправо/влево*, как показано на рис. 1.

© Каргин А.А., Пятикоп Е.Е.

2. *Прямые наклоны головы* или *наклоны вперед/назад*, как показано на рис. 2.
3. *Боковые повороты головы* или *повороты вправо/влево*, как показано на рис. 3.
4. *Комбинированные повороты* головы, сочетающие в себе положения первых трех групп, показанные на рис. 4.



Рис. 1. Боковые наклоны



Рис. 2. Наклоны вперед или назад



Рис. 3. Боковые повороты



Рис. 4. Комбинированные повороты

Обоснование выбора характерных точек лица для определения положения головы

Известно, что в процессе зрительного восприятия взгляд человека перемещается по изображению, останавливаясь на некоторое время на точках фиксации [8, 9]. Установлено, что при рассматривании вида человеческого лица в фас наибольшее внимание вызывают участки изображения, соответствующие расположению глаз, носа и рта [10].

Глаза характеризуются центром зрачка, внутренними и внешними уголками, а также границами бровей. К характеристикам носа относят такие точки как переносица, кончик носа, подносовая точка, контуры крыльев носа. Губы характеризуют верхней и нижней точками на оси симметрии лица и уголков [10, 11].

Результаты исследований по выбору и определению влияния характерных точек на различные положения головы приведены ниже.

Наиболее существенные точки можно выделить при рассмотрении различных положений головы.

Области глаз.

При положении головы человека в фас на лице хорошо выражена горизонтальная линия, соединяющая наружные уголки глаз. При боковом наклоне эта линия нарушается. С горизонтальной линии смещаются и центры значков, и наружные и внутренние уголки глаз, и наружные точки конца бровей, как видно из рисунка 1. Поэтому для определения бокового наклона можно использовать любые из этих элементов.

При наклоне головы вперед или назад положение глаз и его элементов изменяется только относительно других элементов лица, но не относительно горизонтальной или вертикальной осей. При этом наклоне зрачков может быть вообще не видно, как показано на рисунке 2. Значительно изменяется расстояние между веком и границей бровей, но у некоторых людей бровей на изображении практически не видно, либо брови могут быть закрыты прической или очками, либо оправа очков может быть воспринята как брови.

При повороте головы вправо или влево (боковой поворот) как видно из рисунка 3 глаза опять же смещаются относительно других элементов лица, при этом либо наружные, либо внутренние уголки глаз могут быть не видны. Из этого же рисунка видно, что положение зрачков глаза при таком повороте может не соответствовать положению всего лица.

Вообще положение зрачка не всегда действительно отражает поворот или наклон головы, т.к. человек не всегда смотрит в ту сторону, куда повернут, либо человек обладает косоглазием, либо его глаза прикрыты.

В итоге после рассмотрения различных поворотов головы можно сделать вывод, что для дальнейшего использования при выборе фронтального фото рекомендуется использовать центры глаз, как середина расстояния между его наружными и внутренними уголками.

Область носа

К характеристикам носа, как уже отмечалось ранее, относится переносица, кончик носа, подносовая точка, контуры ноздрей. Но форма нижнего края носа в значительной степени индивидуальна. Поэтому некоторые точки, такие как подносовая и ноздри у одних людей видны уже при вертикальном положении головы, а у других только при сильном наклоне назад.

Лицо человека имеет ярко выраженную вертикальную осевую симметрию, причем эта ось чаще всего проходит через основные элементы носа.

При боковом повороте происходит значительное смещение элементов носа относительно оси как показано на рисунке 1. Поэтому для определения бокового поворота можно использовать все основные элементы носа.

Как видно по рисунку 2 при наклоне вперед или назад положение носа значительно изменяется. Особенно заметно это для кончика носа, который значительно поднимается к линии глаз при наклоне назад и стремится коснуться губ при наклоне вперед. При наклоне вперед ноздри уже не видны.

При боковом повороте кончик носа значительно смещается с вертикальной оси симметрии, также изменяется и положение и переносицы. Это видно на серии фотографий рисунка 3.

Из разбора положения носа при различных поворотах и наклонах можно сделать вывод, что для дальнейшего анализа можно использовать кончик носа и переносицу.

Область губ.

Губы характеризуют верхняя и нижняя точки губ на оси симметрии лица и уголков.

При фронтальном положении головы через уголки губ проходит хорошо выраженная горизонтальная линия.

При боковом наклоне, как видно на рисунке 1, эта линия существенно изменяется, а в связи с изменением положения вертикальной оси симметрии меняют свое положение верхняя и нижняя точки губ.

При наклоне назад или вперед появляется прогиб сомкнутых губ. Такой прогиб может быть, если человек улыбается, и о прогибе уже говорить не приходится, если приоткрыт рот.

По рисунку 2 также видно, что изменяют свое положение верхняя и нижняя точки губ, но относительно остальных элементов лица.

При боковых поворотах уголки губ практически остаются на горизонтальной линии, а большее смещение происходит с вертикальной линии симметрии верхней и нижней точек губ.

В итоге анализа положения губ при различных поворотах можно сделать вывод, что наиболее полезно будет использовать центр губ, как центр между уголками губ и центр между верхней и нижней точками на оси симметрии. Данная точка более подходит т.к. верхняя точка на губе может быть прикрыта усами, а нижняя – бородой.

В результате рассмотрения основных элементов лица и их характеристик для дальнейшего определения положения головы наиболее приемлемо использовать такие характерные лицевые точки как центры глаз, точка кончика носа, центр губ и точка переносицы, показанные на рисунке 5.

Координаты соответственно этих точек будут $p_1, p_2, p_3, p_4, p_5 \in P$, где $P = \{(i, j) \mid i = \overline{1,R}; j = \overline{1,Q}\}$.

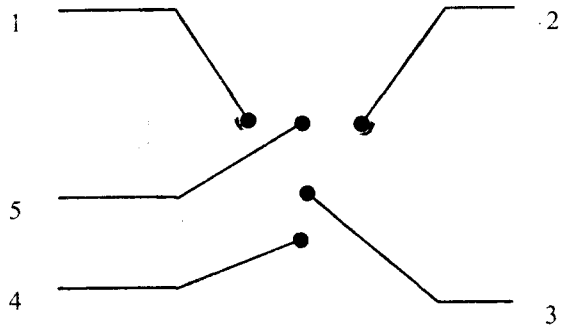


Рис. 5. Положение характерных точек лица

Общая схема модели отбора фронтального фото из серии фотографий

Исходя из поставленной задачи, имеем набор фотографий $f_i \; i \in 1...N$, каждую из которых можно приставить такой моделью:

GF=< P, L, M>, где

$P = \langle p_1, p_2, p_3, p_4, p_5 \rangle$ – множество координат характерных точек;

$L = \langle L_1, L_2, L_3, L_4, L_5, L_6, L_7 \rangle$ – множество расстояний между характерными точками;

$L_1 = \ell_2(p_1, p_4), \quad L_2 = \ell_2(p_2, p_4), \quad L_3 = \ell_2(p_1, p_3), \quad L_4 = \ell_2(p_2, p_3),$

$L_5 = \ell_2(p_5, p_4), \quad L_6 = \ell_2(p_3, p_5), \quad L_7 = \ell_2(p_3, p_4),$

где $\ell_2(p_i, p_j)$ – евклидово расстояние между точками p_i и p_j;

$M = \langle BN, PN, BP \rangle$ – множество функций принадлежности к каждому виду поворота,

где $BN = \{f_i, \mu_{BN}(f_i)\} \qquad PN = \{f_i, \mu_{PN}(f_i)\} \qquad BP = \{f_i, \mu_{BP}(f_i)\}$

$\mu_{BN} : F \to [0,1]$ или $\mu_{BN}(f_i) \in [0,1]$ – функция принадлежности, заданная на наборе f_i $i \in 1...N$, и выражающая субъективную уверенность в том, что положение лица на фотографии f_i относится к боковому наклону головы (рис. 1).

$\mu_{PN}(f_i) \in [0,1]$ – функция принадлежности, заданная на наборе $f_i \; i \in 1...N$ и выражающая субъективную уверенность в том, что положение лица на фотографии f_i относится к прямому наклону головы (рис. 2).

$\mu_{BP}(f_i) \in [0,1]$ – функция принадлежности, заданная на наборе $f_i \; i \in 1...N$ и выражающая субъективную уверенность в том, что положение лица на фотографии f_i относится к боковому повороту головы (рис. 3).

Теперь рассмотрим процесс вычисления соответствующих функций принадлежностей к каждому из поворотов.

Определение функции принадлежности к боковому наклону.

Так при боковом наклоне головы, как было рассмотрено выше, наиболее значительно происходит отклонение центров глаз с горизонтальной линии и смещение вертикальной линии, проведенной через центр носа (точка 3), центр рта (точка 4) и точку переносицы (точка 5). Исходя из этого, на функцию принадлежности $\mu_{BN}(f_i)$ влияют два основных параметра B' и B'', которые показывают размеры отклонений от горизонтальной и вертикальной линий и рассчитываются по формулам:

$$B' = | y_{p_1} - y_{p_2} |$$
$$B'' = | x_{p_3} - x_{p_4} | \text{ или } B'' = | x_{p_5} - x_{p_4} | \quad (*)$$

где y_{p_i} – ордината i-й точки, x_{x_i} – абсцисса i-й точки.

Тогда $\mu_{BN}(f_i)$ будет вычисляться так:

$$\mu_{BN}(f_i) = \frac{S(B_i') + S(B_i'')}{2}, \quad (**)$$

где $S(t_i) = \frac{i}{n}$ для $t_{i-1} < t_i < t_{i+1}$, а t_i – параметр данного типа положения головы.

Фактически функция S упорядочивает по возрастанию набор фотографий согласно указанному параметру t_i, при этом, чем больше величина параметра t_i тем сильнее это фото относится к данному типу положения головы.

Сама функция принадлежности $\mu_{BN}(f_i)$, рассчитанная по формуле (**), отражает усредненное значение относительно всех параметров, при этом наименьшее значение $\mu_{BN}(f_i)$ будет иметь фотография приближенная к фронтальной.

Определение функции принадлежности к боковому повороту.

Для бокового поворота, как описывалось выше, характерно изменение положения центра носа, а также относительное изменение центров глаз и рта. Поэтому определение принадлежности к боковому повороту выполняется по следующим параметрам:

$$P' = | L_1 - L_2 |$$
$$P'' = | L_3 - L_4 |$$
$$P''' = | L_5 - (L_6 + L_7) |$$

Тогда $\mu_{BP}(f_i)$ будет вычисляться так:

$$\mu_{BP}(f_i) = \frac{S(P_i') + S(P_i'') + S(P_i''')}{3}$$

Определение функции принадлежности к прямому наклону.

Прямые наклоны наиболее тяжело определить, имея только эти 5 точек, приблизительно это можно определить по такому параметру как:

$$V = | L_6 - L_7 |$$

Тогда $\mu_{PN}(f_i)$ будет вычисляться так:

$$\mu_{PN}(f_i) = S(V_i)$$

Описание экспериментов

Традиционно для оценки эффективности методов распознавания лиц используется база данных FERET [12]. Но поскольку база данных лиц FERET не содержит набора фотографий с различными углами поворотов и наклонов головы для одного человека, то была составлена собственная база лиц.

База состоит из 10 наборов фотографий, каждый из которых содержит в среднем по 20 фото одного и того же человека. Фотографии использовались размером 350 на 467 с разрешением 72 точки на дюйм и градацией серого цвета 8 бит. Для двух человек использовались два различных набора фотографий. В каждом наборе фотографий была выбрана эталонная фотография. Относительно каждой фотографии набора вычислялась функция принадлежности к фронтальному виду. После сортировки фотографий в порядке убывания функции принадлежности получены графики для каждого набора. На рисунке 6 показаны фрагменты графиков после исключения фотографий с функцией принадлежности менее 0,5.

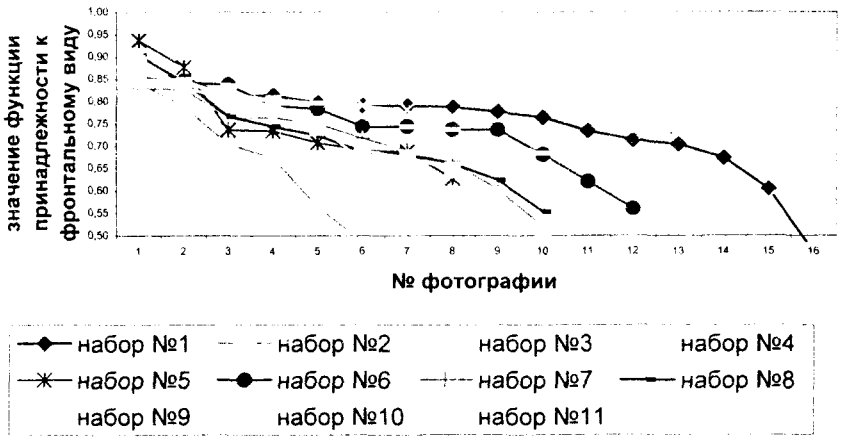


Рис. 6. результаты эксперимента на 11 наборах фотографий в виде графиков

Из рисунка видно, что фотографии №1 соответствуют фронтальному виду с уверенностью 85-95%.

Опыты показали, что применение данного метода позволяет определить фотографию наиболее приближенную к фронтальной. При этом метод дает положительный результат при использовании изображений лица с различным масштабом.

РЕЗЮМЕ

В публікації запропонований метод вибору точки серії фотографій зображення обличчя людини, яке найбільш наближене до фронтального точки. Метод ґрунтується на точки точках обличчя. Точки обґрунтовування вибору даних точок, а також опис проведених експериментів.

SUMMARY

A method of choice from the series of pictures of image of face of man, which is most close to the frontal kind is offered in the publication. A method is based on the character points of person. A ground of choice of given points is led, and also description of conducted experiments.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Каргин А.А., Ефремова А.В., Пятикоп Е.Е. Обзор методов распознавания лица человека на фотографии // Материалы 13-й региональной научно-технической конференции. ПГТУ, Мариуполь. – 2006.
2. Осипов А.А., Морзеев Ю.В., Мурынин А.Б. Использование анизотропных свойств изображения для определения пространственной ориентации головы в задачах распознавания лица // Корп. СПИРИТ, www.spiritcorp.com
3. Нюнькин К.М. Определение углов наклона головы человека на изображениях // «Искусственный интеллект». – Донецк. – 2004, №1. – С. 243-250.
4. Мурыгин К.В. Автоматический анализ цифровых изображений с целью обнаружения лиц с боковым поворотом // «Искусственный интеллект» – Донецк 2005, №3. – С. 649-657.
5. Тухтасинов М.Т. Алгоритмы локализации лица и определения его признаков на изображении // «Искусственный интеллект». – Донецк. – 2004, №2 стр. 184-187.
6. Moghaddam B., Pentland A. A Subspace Method for Maximum Likelihood Target Detection // Proc. of IEEE Int. Conf. on Image Processing. – Washington D.C., 1995,v3. – p.512-515.
7. Белоцерковский О.М., Глазунов А.С., Щенников В.В. Компьютерное распознавание человеческих лиц // Зарубежная радиоэлектроника, 1997, N8. – С.3-14.
8. Демидов В.Е. Как мы видим то, что видим. – 2-е изд., перераб. и доп. М.: Знание, 1987 (Наука и прогресс). – 240 с.
9. Шиффман Х.Р. Ощущение и восприятие. 5-е изд. – СПб.: «Питер», 2003. – 928 с., ил.
10. Ярбус А.Л. Роль движений глаз в процессе зрения / Институт проблем передачи информации. – М.: Наука, 1965. – 166 с.
11. Григорьев А.В., Каргин А.А. Метод нечеткого поиска неизвестного лица по фотопортрету // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: «Обчислювальна технікаа та автоматизація». Вип. 88. – Донецьк, ДонНТУ, 2005. – С.113-119.
12. P. Jonathon Phillips & other, The FERET Evaluation Methodology for Face-Recognition Algorithms. Technical report NISTIR 6264. – 1999. – 20 p.

Надійшла до редакції 19.04.2007 р.

УДК 681.518

МЕТОД БАЛАНСИРОВАНИЯ ЗАГРУЗКИ КОНВЕЙЕРА С ПОМОЩЬЮ ВЕКТОРОВ ВЕТВЛЕНИЯ

А.И.Рязанцев, М.Е.Щербакова,
Технологический институт Восточноукраинского национального университета имени В.Даля, г. Северодонецк

Введение. Одним из эффективных средств повышения производительности вычислительных систем является реализация векторных вычислений на конвейерных ЭВМ или на системах с несколькими процессорными элементами. Особенно актуальными для компьютерных систем управления и других систем обработки больших массивов данных являются вопросы эффективного использования конвейерной обработки данных, так как процессоры с усовершенствованными конвейерами в настоящее время приобретают все большую популярность. Например, в процессорах, поступивших в продажу в последние годы, длина конвейера достигает 20 и более ступеней (Intel Pentium 4, AMD Athlon XP).

В автоматизированных системах управления технологическими процессами также обрабатываются большие массивы однотипных данных, а, значит, имеется потенциальная возможность эффективного использования конвейера за счет использования векторной обработки данных. Например, первичная обработка массива значений, снимаемых с аналоговых датчиков, выполняется практически по одному и тому же алгоритму с выборочной обработкой значений. Здесь подчеркнем, что для практической векторизации таких алгоритмов нужна именно выборочная обработка элементов массива, позволяющая перед каждой арифметической обработкой элементов массива решать, над какими из элементов производить операции, а над какими – пропустить. Наличие в системе программирования эффективных средств векторной обработки с возможностью её ветвления в зависимости от динамически возникающих условий решило бы эту проблему.

Кроме того, так как в настоящее время отечественные системы разработки программ отсутствуют на рынке программных средств, средства векторного программирования должны быть встроенными в современные зарубежные системы подготовки программ, подобные Microsoft Visual Studio. При этом они должны быть ориентированы на имеющиеся в компиляторах этих систем средства векторного распараллеливания.

Основная часть. В стандарте языка программирования C++ уже имеются средства, способные ускорять вычисления за счет векторизации вычислений – шаблон классов valarray [1]. С использованием вспомогательных механизмов этого шаблона, таких как срезы, обобщённые срезы, маски или косвенные массивы, можно выполнять операции над подмножествами элементов векторов. Но использование этих механизмов затруднено из-за их нетрадиционного синтаксиса и приводит к головоломным алгоритмическим и программным конструкциям. Их практически нельзя использовать для регулярной векторной обработки по ветвящимся алгоритмам. Кроме того, при их использовании конвейер процессора в полной мере не загружается из-за перемежающих вычисления операций условного перехода. Для увеличения средней загрузки конвейера следовало бы минимизировать число условных переходов и отделить их от операций обработки данных [2].

Для преодоления перечисленных недостатков шаблона valarray был разработан другой шаблон классов – vcarray, включающий в себя практически все возможности шаблона valarray, но обеспечивающий совместно с другим управляющим классом возможности ветвления векторной обработки.

Новизна разработанных средств заключается в том, что впервые разработаны средства векторной обработки, при использовании которых каждый элемент векторов данных может обрабатываться по своему собственному алгоритму. Операции над отдельными элементами векторов могут пропускаться, ветвиться или повторяться в зависимости от результатов предшествующих операций над элементами данных с этим же индексом.

Внешне объявление шаблона vcarray выглядит практически так же, как и объявление стандартного библиотечного шаблона valarray. В его состав входят все логические, арифметические, тригонометрические операции, а также несколько функций, обеспечивающих удобное для пользователя создание массивов данных.

Чтобы обеспечить выборочную обработку элементов векторов в зависимости от динамически вырабатываемых векторных условий, все арифметические, логические операции и операции сравнения выполняются только для тех элементов векторов, индексы которых перечислены в текущем векторе ветвления. Текущий вектор ветвления формируется специальными инструкциями, речь о которых пойдет ниже. Эти инструкции добавляют в специальный массив индексы элементов, соответствующих заданному условию (т.е. вектор ветвления), и в конце дописывается количество удовлетворяющих условию эле-

 © Рязанцев А.И., Щербакова М.Е.

ментов. Текущий вектор ветвления всегда размещается на вершине специального управляющего массива, организованного по стековому принципу и предназначенного для хранения векторов ветвления, в общем случае, разной размерности.

Инструкции векторной обработки в реализации на языке C++ были представлены в виде макросов, которые управляют созданием и удалением текущего вектора ветвления.

Первая инструкция устанавливает текущую размерность векторной обработки, т. е. размер всех векторов vcarray, участвующих в обработке, независимо от типа их элементов; вызов ее выглядит так:

```
SetVcarraySize(125);
```

Далее в программе объявляются переменные типа vcarray для хранения и обработки массивов:

```
vcarray<int> vc;
```

После этого в массив (в приведенном примере – в массив целых чисел vc) заносятся значения всех элементов, после чего можно приступать к их обработке.

Вторая инструкция управления векторной обработкой записывает в управляющий массив (вектор ветвления) индексы элементов, удовлетворяющих заданному условию:

```
VcarrayIf(vc == 44) // Формирование вектора ветвления из индексов элементов,
                    // удовлетворяющих условию (условное выражение может быть любым).
    vc/=15;         // Вычисление новых значений элементов, удовлетворяющих условию
                    // (выражение может быть любым).
```

Третья инструкция записывает в управляющий массив индексы элементов, напротив, не соответствующие последнему условию:

```
VcarrayElse     // Формирование нового вектора ветвления
                // и обработка соответствующих ему элементов.
  vc = 17;
EndVcarrayIf  // Возврат к предыдущему вектору ветвления.
```

Новый вектор ветвления будет сформирован из индексов элементов, не вошедших в предыдущий вектор ветвления:

$$BV[k] = BV[k-1] - BV[k]$$

Инструкция EndVcarrayIf должна завершить приведенную конструкцию; она удаляет вектор ветвления, созданный инструкциями VcarrayIf(условие) и VcarrayElse.

Следующие две инструкции предназначены для обработки данных в цикле. В первой проверка условия выполняется перед выполнением цикла, во второй – после каждой итерации цикла. Эти инструкции заменяют текущий вектор ветвления при каждой итерации.

Вызов первого варианта цикла (с предусловием):

```
VcarrayWhile(vc < 110)  // Циклическая условная векторная
                        // обработка (цикл выполняется, пока есть
                        // хотя бы один элемент, удовлетворяющий
                        // условию цикла).
  vc *= 2;              // Произвольная обработка элементов.
EndVcarrayWhile         // Возврат к предыдущему вектору ветвления.
```

Инструкция EndVcarrayWhile завершает цикл и удаляет вектор ветвления, использовавшийся в цикле. Определена еще одна инструкция цикла, с проверкой условия в конце каждой итерации – VcarrayDo – VcarrayDoWhile(условие):

```
VcarrayDo               // Циклическая условная векторная
                        // обработка с анализом условия в конце цикла.
  vc += 1;              // Любые действия над элементами массива.
VcarrayDoWhile(vc < 21)
```

Командой VcarrayDoWhile(условие) цикл заканчивается. Она состоит из проверки условия и создания вектора ветвления из элементов, соответствующих условию.

Можно утверждать, что шаблона vcarray, структуры для хранения векторов ветвлений и набора инструкций для ветвления обработки VcarrayIf(vcarray<bool>), VcarrayElse, EndVcarrayIf, инструкций повторения VcarrayWhile(vcarray<bool>) – EndVcarrayWhile, VcarrayDo – VcarrayDoWhile(vcarray<bool>) и инструкций следования достаточно для построения ветвящихся программ векторной обработки любой степени сложности так же, как и при скалярной обработке данных. Это определяется тем, что в соответствии с правилами структурного программирования для создания программы любого уровня сложности достаточно инструкций следования, ветвления и повторения. Шаблон vcarray предоставляет эти три вида инструкций, идентичных тем, что есть в процедурных языках программирования, следовательно, с его помощью можно написать программу любой степени сложности.

Для оценки эффективности условных векторных вычислений рассмотрим последовательность выполнения инструкций при скалярной обработке массива технологических данных (рис. 1).

В качестве примера на рис. 1 представлена последовательность инструкций небольшого фрагмента программы первичной обработки технологических данных, снимаемых с термопар, термометров сопротивления и других линейных и нелинейных аналоговых датчиков. Приведенная последовательность обработки представляет собой цикл по данным технологических параметров из N+1 итерации, каждая из которых обеспечивает масштабирование и применение фильтра первого порядка к введенному аналоговому значению. Каждая итерация включает в себя два условных перехода, изменяющих последовательность обработки инструкций в зависимости от значений технологических данных для каждого параметра в отдельности. Кроме того, практически каждая вторая инструкция зависит по данным от предшествующей ей инструкции.

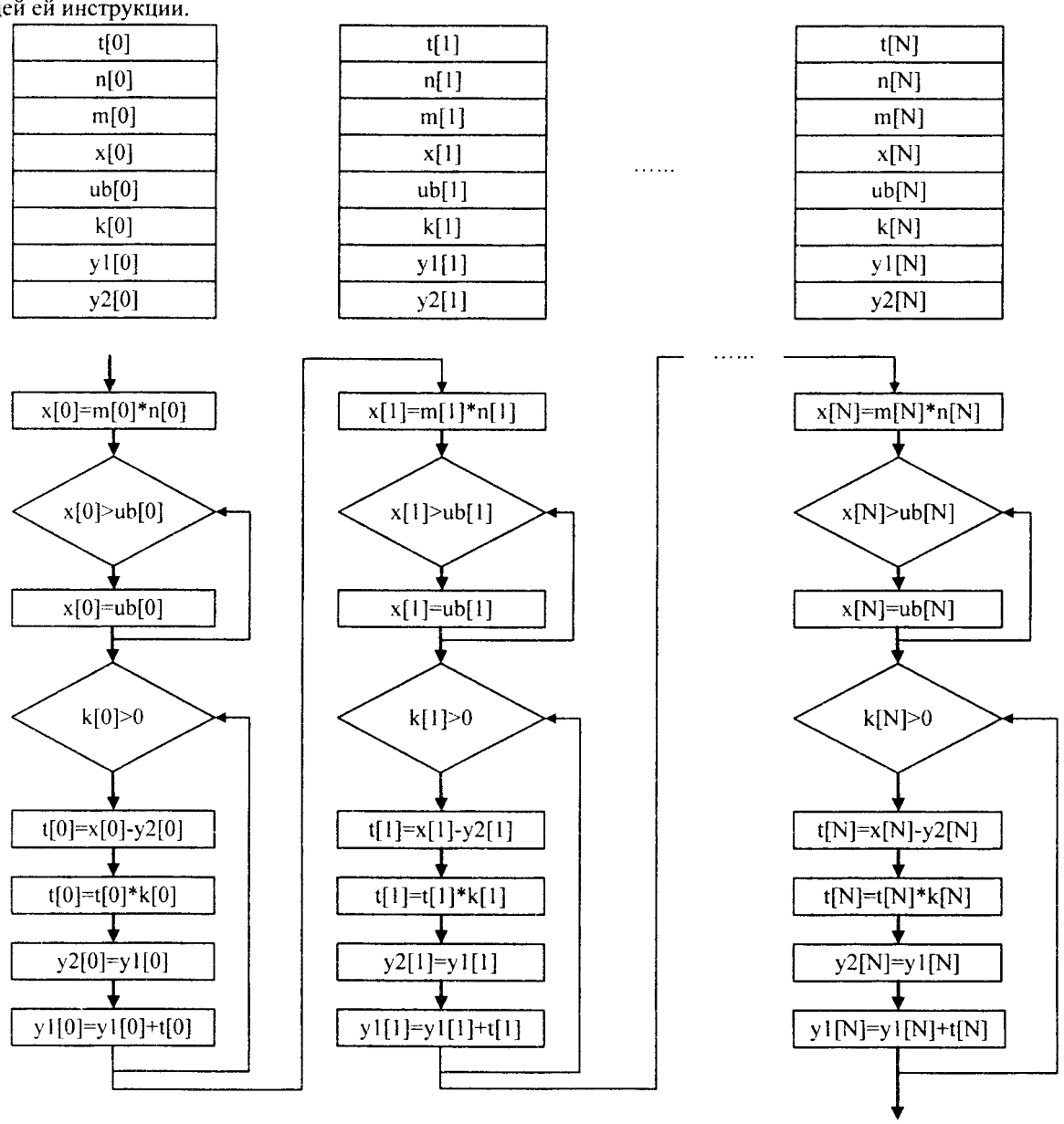


Рис. 1. Поток управления при скалярной обработке технологических данных

В реальной управляющей вычислительной системе тело представленного цикла существенно сложнее, так как, например, для нелинейных датчиков нужно снятые с них значения приводить к линейной шкале, используя полиномы и/или таблицы преобразования нелинейных значений. Это означает, что в реальности основной цикл приведенного фрагмента обработки включает в себя вложенные циклы и дополнительные ветвления, возможно, вложенные друг в друга. Кроме того, количество инструкций тела цикла приведенного фрагмента в реальной подсистеме первичной обработки технологических параметров в сотни раз больше, чем это представлено на рис. 1.

Как видно из приведенной на рисунке последовательности выполнения инструкций, в каждой итерации цикла будут возникать проблемы с загрузкой конвейера процессора из-за инструкций условного перехода [3] и взаимосвязи инструкций по данным. Так как в реальной системе тело цикла первичной обработки данных включает тысячи инструкций с сотнями инструкций условного и безусловного переходов, аппаратные средства борьбы с конфликтами в конвейере (буфер предвыборки, буфер адресов переходов, буфер циклов, а также реализованная в процессоре стратегия предсказания переходов) не могут сгладить все конфликты и в достаточной степени загрузить все ступени конвейера.

Теперь рассмотрим последовательность инструкций того же фрагмента программы первичной обработки технологических данных, но реализованную с использованием предложенных в работе средств условных векторных вычислений (рис. 2).

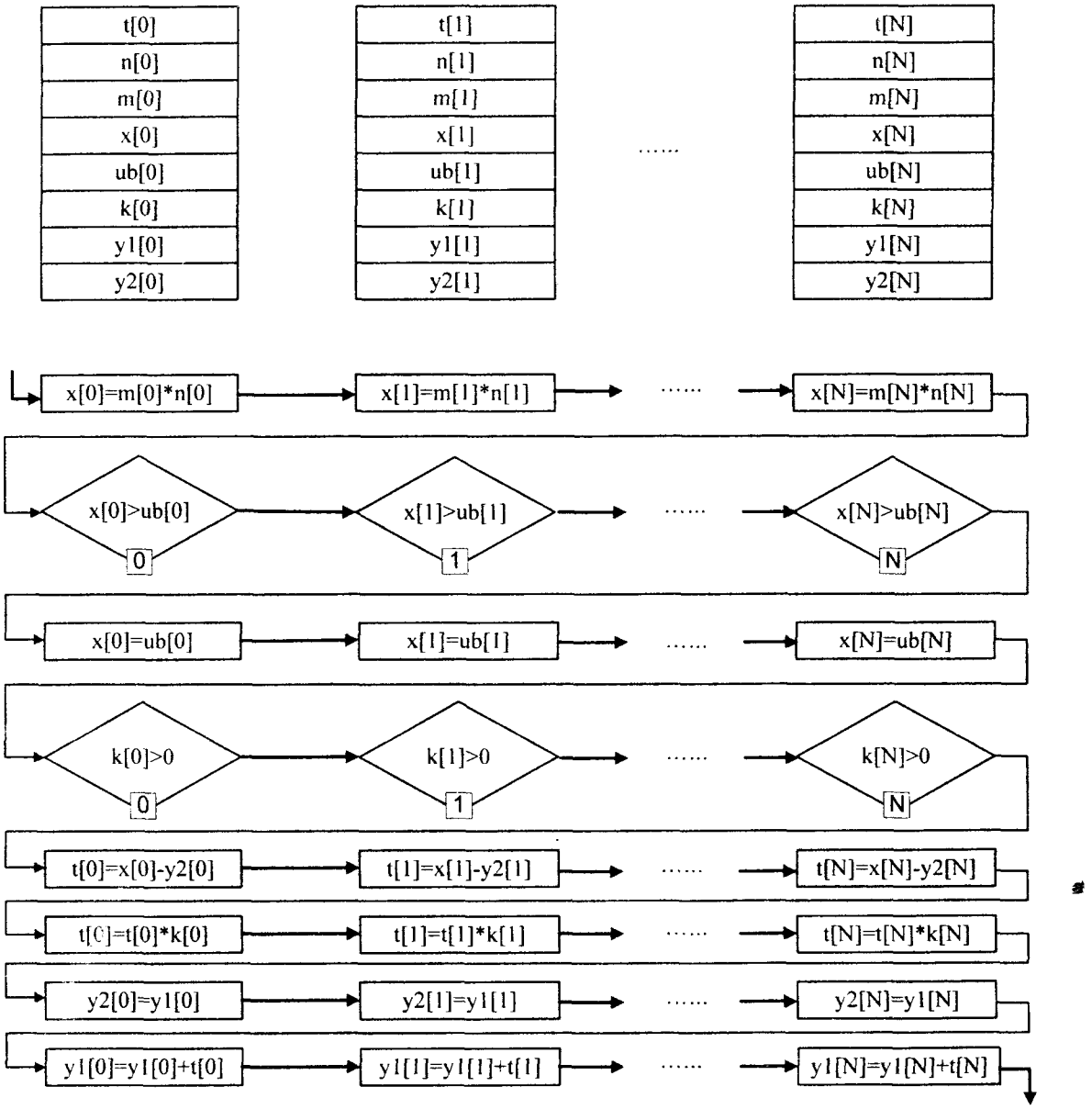


Рис. 2. Поток управления при условной векторной обработке технологических данных

Каждая строка в схеме алгоритма на рис. 2 представляет собой базовый цикл, который выполняет N+1 раз или меньше одну и ту же инструкцию над одноименными элементами данных незаблокированных индексов технологических параметров. Это же относится и к операциям условного перехода, обозначенным на рисунке ромбами с маленькими прямоугольниками с индексами внутри. Каждая такая операция состоит из двух инструкций процессора: инструкции условного перехода и инструкции записи индекса в вектор ветвления, если условие выполняется.

Очевидно, что коды инструкций каждого из циклов условной векторной обработки полностью

размещаются в буфере цикла процессора первой ступени конвейера, что практически исключает этап выборки инструкций из оперативной памяти. Так как каждая очередная инструкция гарантированно выполняется над набором данных, другим, чем наборы данных всех предшествующих выполняемых в цикле инструкций, в одном цикле полностью исключаются все конфликты по данным. Для обрабатывающих циклов также практически исключаются конфликты по управлению, так как направление перехода при выполнении базового цикла определяется самой инструкцией организации цикла, а другие инструкции ветвления отсутствуют. При условных векторных вычислениях конфликты по управлению могут возникать только при выполнении векторных операций ветвления. Но учитывая простоту цикла операции ветвления (две инструкции), для сглаживания этих конфликтов достаточно наличия в конвейере простой двухуровневой схемы предсказания переходов.

Таким образом, при условной векторной обработке массивов данных устраняются основные причины неполной загрузки конвейера процессора, а значит, производительность процессора при такой обработке может значительно повыситься по сравнению со скалярной обработкой, если в процессоре имеется современный конвейер со значительным количеством ступеней конвейера.

Пример использования разработанных программных средств в виде программы на языке C++, выполняющей действия, показанные на рис. 1 и 2:

```
int _tmain(int argc, _TCHAR* argv[])
{
 #define arr_size 250
 SetVcarraySize(arr_size); // Указание размера вектора ветвления.
 // Объявить контейнеры для обработки массивов.
        vcarray<double> x(arr_size);
        vcarray<double> m(arr_size);
        vcarray<double> n(arr_size);
        vcarray<double> ub(arr_size);
        vcarray<double> k(arr_size);
        vcarray<double> y1(arr_size);
        vcarray<double> y2(arr_size);
        vcarray<double> t(arr_size);
        // Присвоить значения элементам массивов x, m, n,  ub, k, y1, y2, t.
        // Выполнить обработку данных:
        x=m*n;
        VcarrayIf(x > ub)
                x=ub;
        EndVcarrayIf
        VcarrayIf(k > 0.0)
                t = x – y2;
                t *= k;
                y2 = y1;
                y1 += t;
        EndVcarrayIf
 return 0;
}
```

Разработанный шаблон классов для условных векторных вычислений был использован в системе SCADA пакета прикладных программ КВАРЦ в подсистемах обработки и оперативного отображения технологических данных, что, в частности, дало возможность отображать оперативные графики тенденций десятков технологических параметров на экранах с периодом обновления до 200 мсек (рис. 3).

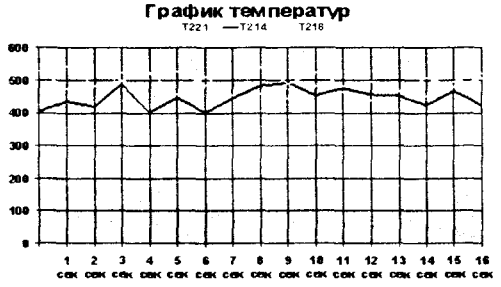


Рис. 3. Пример оперативной диаграммы

Так как стандартный шаблон valarray библиотеки STL языка программирования C++ в первую очередь был разработан с целью эффективного использования конвейеров и других средств ускорения вычислений, было проведено сравнительное тестирование разработанного шаблона vcarray с этим стандартным шаблоном на примерах, которые допускают программирование с помощью того и другого шаблона классов. Время обработки массивов данных с использованием обоих шаблонов классов показано на диаграмме (рис. 4).

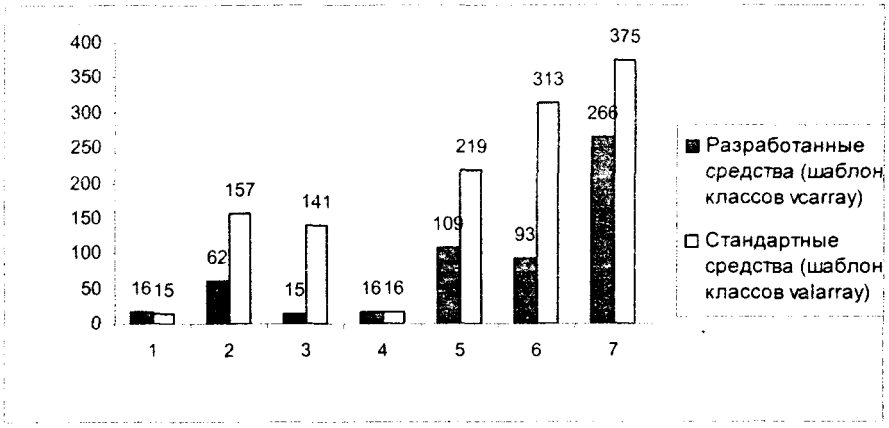


Рис. 4. Соотношения времен выполнения различных тестов разработанными средствами и стандартными средствами

Скорость выполнения математических операций при использовании разработанных средств управления векторной обработкой, как видно из рис. 4, в среднем превосходит более чем в 2 раза скорость выполнения тех же операций, выполняемых с помощью стандартного шаблона классов valarray из библиотеки STL языка C++.

Как показали проведенные тесты, шаблон классов vcarray показывает меньшее время выполнения операций в программах с использованием вложенных условных операторов или циклов, когда число элементов вектора ветвления существенно уменьшается от итерации к итерации, либо когда производится множество операций с элементами после вычисления очередного вектора ветвления.

В проведенных семи тестах эффективность использования шаблона vcarray сравнивалась со стандартным шаблоном valarray на фрагментах программ, на которых максимальная загрузка конвейера при скалярной обработке обычно не обеспечивается из-за условий, не позволяющих обрабатывать одинаковым образом все элементы векторов.

Выводы. Разработанные средства условных векторных вычислений дают возможность обрабатывать массивы данных по алгоритмам любой степени сложности, в том числе включающие структурные операторы ветвления и циклов, вложенные друг в друга на любую глубину. Условная векторная обработка данных сводится к последовательностям простых циклов, которые распараллеливаются компиляторами Intel 8.0, MS VC++ 7.1, GCC, Borland C++ Builder v.2.3 в последовательности векторных операций над независимыми элементами данных, и таким образом практически полностью загружается конвейер процессора во время выполнения. За счет более полной загрузки конвейера центрального процессора скорость выполнения математических операций при использовании разработанных средств управления векторной обработкой превосходит больше чем в 2 раза скорость выполнения тех же операций, выполняемых с помощью стандартного шаблона классов valarray из библиотеки STL языка C++, обладающего меньшими возможностями.

РЕЗЮМЕ

З метою балансування роботи конвеєра процесора запропоновано програмний механізм умовної векторної обробки технологічної інформації. Розроблено програмні засоби роботи з масивами даних, при використанні яких кожен елемент векторів даних може бути оброблено за своїм власним алгоритмом. Розроблені засоби забезпечують більш повне завантаження конвеєра центрального процесора в порівнянні з іншими існуючими засобами обробки масивів технологічної інформації. Швидкість виконання математичних операцій при використанні розроблених засобів перевищує більш ніж у 2 рази швидкість виконання тих же операцій, що виконуються з використанням схожих програмних засобів з меншими можливостями.

SUMMARY

Program mechanism of conditional vector processing is proposed for processor' conveyor balancing. Special software tools were developed for data arrays processing. While using it, every element of data vectors may be processed by its

own algorithm. Developed tools provide more complete processor's conveyor load in comparison with other tools of technological data arrays processing. Mathematical operations execution using developed tools is faster in more than 2 times than execution of those operations, using similar tools with lesser possibilities.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Плаугер П., Степанов А., Ли М., Массер Д. STL – стандартная библиотека шаблонов C++. Пер. с англ. – СПб.: БХВ-Петербург, 2004. – 656 с.
2. Рязанцев О.І., Ларгіна А.М. Організація обчислювальних процесів в комп'ютерних системах: Навчальний посібник. – Луганськ: Вид-во СНУ ім. В.Даля, 2006. – 608 с.
3. Цилькер Б. Я., Орлов С. А. Организация ЭВМ и систем: Учебник для вузов. – СПб.: Питер, 2004. – 668 с.

Надійшла до редакції 20.11.2007 р.

УДК: 633.358: 631.531.2: 631.531.12: 631.521.5

ЕФЕКТИВНІСТЬ ВИРОЩУВАННЯ ГОРОХУ У ЗМІШАНИХ ПОСІВАХ

Д.М.Дергачов, А.Д.Клинишов, С.І.Дергачова,
Донецький інститут агропромислового виробництва УААН

Продуктивність посівів гороху визначається, перед усім, відповідністю реальних погодних умов, що складаються протягом вегетаційного періоду, оптимальним умовам росту і розвитку рослин. Серед решти бобових горох є найбільш пристосованим до природно-кліматичних умов східного Степу України [5]. Тут він вирощується як основна бобова культура на продовольчі та фуражні цілі.

Зважаючи на нестійкий характер зволоження більшої частини території Донецької області, урожайність гороху зазнає значних коливань по роках, а невисока економічна ефективність (через існуючий диспаритет цін на промислову і сільськогосподарську продукцію) іноді ставить під сумнів доцільність вирощування цієї культури у регіоні.

Одним із напрямків стабілізації продуктивності і підвищення економічної ефективності вирощування фуражного зерна є розповсюджена у Ростовській області Російської Федерації практика застосування змішаних посівів гороху із зерновими культурами [4].

На наш погляд для умов східного Степу України, актуальним є не тільки вивчення ефективних способів вирощування гороху у змішаних посівах із визначенням оптимального співвідношення компонентів, але встановлення також можливості одержання повноцінного посівного матеріалу гороху для закладки товарних посівів.

З цією метою в Донецькому інституті АПВ у 2006 році розпочато дослідження з вивчення реакції різних за морфологічним типом сортів гороху на їх вирощування у чистому виді та у сумішах. У змішаних посівах середньопізнього сорту гороху Резонатор використовувався злаковий компонент овес (сорт Скакун), у середньостиглих сортів: Девіз та Луганський – ярий ячмінь (сорт Гетьман). Дослід закладено методом рендомізованих блоків у чотириразовій повторності. Попередник – озима пшениця. Облікова площа ділянки 15 м^2. Врожай гороху збирали комбайном Сампо–130. Посівні якості насіння визначали за відповідними методиками [1, 2].

Варіантами способів вирощування було обрано чистий посів гороху (контроль) та зернобобова суміш у співвідношенні норм висіву гороху та злакового компонента 50 % + 50 % та 75 % + 25 % від номінальної норми висіву цих культур в одновидових посівах.

Згідно результатів досліджень у 2006 році, вирощування гороху у змішаних посівах дозволило одержати більший урожай зерносуміші, ніж у чистих посівах гороху. Урожай з кожної ділянки підлягав очищенню на зерноочисній машині аспіраційно–калібрувального типу СМ–0,15. За один робочий цикл ворох вдалося очистити від сміття, а насіння гороху та злакового компонента якісно відділити одне від одного. У виробничих умовах аналогічну операцію можна здійснити на зерноочисних машинах типу К–531 (Петкус–Гігант). Результати обліку урожаю наведено у таблиці 1.

Таблиця 1. Урожайність сортів гороху та компонентів зернобобової суміші у 2006 році, ц/га

Сорт	Варіант вирощування								
	Чистий посів (контр.)	Зернова суміш із ячменем (вівсом)							
		50 % гороху+50 % ячменю (вівсу)				75 % гороху+25 % ячменю (вівсу)			
		Горох	Ячмінь (овес)	Разом		Горох	Яч-мінь (овес)	Разом	
				ц/га	+ до контр., %			ц/га	+ до контр., %
Девіз	17,3	2,7	19,9	22,6	31	5,6	12,5	18,9	9
Луганський	11,4	3,3	16,6	19,9	75	4,7	10,8	15,5	36
Резонатор	13,3	3,1	16,9	20,0	50	5,8	11,7	17,5	32
Точність досліду = 4,4 % НІР $_{0,95}$ = 2,28 ц/га									

Найбільшою мірою зернова продуктивність змішаних посівів зростала при рівному співвідношенні висіяних компонентів (50 % + 50 %) – на 31–75 % у порівнянні з контролем. Інша суміш (75 % + 25 %) також забезпечила достовірне збільшення продуктивності посіву, хоча дещо меншою мірою – на 9 – 36 %.

© Дергачов Д.М., Клинишов А.Д., Дергачова С.І.

У наших дослідах при збільшенні долі бобового компонента у суміші спостерігалось зростання в одержаному врожаї питомої ваги зерна гороху (рис. 1)

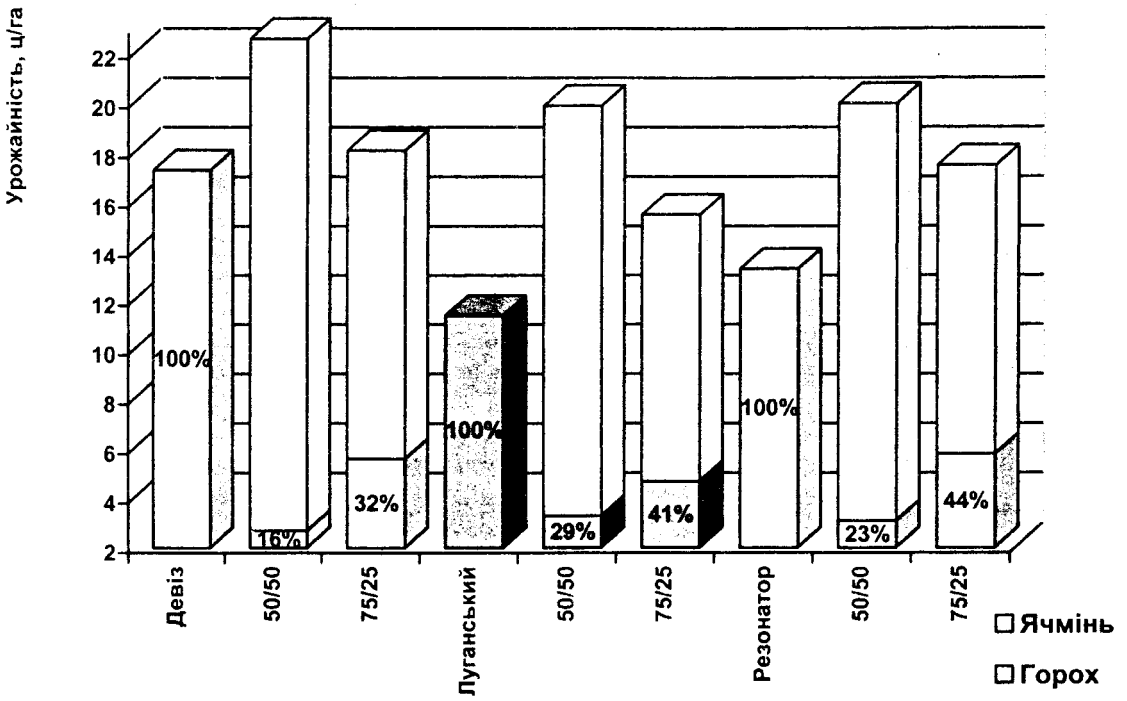


Рис. 1. Продуктивність злако-бобової суміші, 2006 рік

Відмічено різну реакцію сортів гороху на вирощування у змішаних посівах. Ймовірно це пов'язано із особливостями морфофізиологічних типів вивчаємих сортів та їх різною здатністю протистояти у конкуренції за фактори життя іншим видам рослин.

Сорти гороху листочкового типу Резонатор та Луганський меншою мірою знижували урожайність у змішаних посівах порівняно із контрольним варіантом, ніж „вусатий" напівкарликовий сорт Девіз. Якщо в останнього урожайність на дослідних варіантах коливалась у межах 2,7 – 5,6 ц/га , або 16 – 32 % до контролю, то у перших двох вона зростала до 3,1 – 5,8 ц/га і відповідно до контролю становила 23 – 44 %.

Різне співвідношення компонентів в отриманому урожаї вплинуло на харчову цінність фуражного зерна: злако–бобова суміш характеризувалась оптимальним забезпеченням кормової одиниці перетравним протеїном – 102–112 г.

Характеристика посівних якостей насіння гороху залежно від умов вирощування наведена у таблиці 2.

Таблиця 2. Посівні властивості насіння за різних умов вирощування гороху у 2006 році, ц/га

Сорт	Варіант вирощування		
	Чистий посів (контр.)	Зернова суміш із ячменем (вівсом)	
		50 % гороху+50 % ячменю (вівсу)	75 % гороху+25 % ячменю (вівсу)
		Енергія, %	
Девіз	71,0	64,0	72,0
Луганський	78,7	65,0	74,0
Резонатор	79,3	53,3	80,3
		Схожість, %	
Девіз	94,0	87,7	93,0
Луганський	93,7	85,7	94,3
Резонатор	93,0	88,0	92,6
Точність досліду = % $НІР_{0,95}$ = %			

Серед варіантів вирощування гороху, що вивчалися в досліді, нормативними параметрами лабораторної схожості отриманого насіння характеризувалися ті, де культура гороху зазнавала мінімальної конкуренції з боку іншого ботанічного виду: контрольний варіант та варіант із співвідношенням 75 % + 25 %.

При вирощуванні гороху у рівному співвідношенні із злаковим компонентом (50 % + 50 %) зниження показників енергії та лабораторної схожості насіння сягало критичних значень. *За даними Г.Г.* Котлярова (1987), у насіння гороху з пониженими посівними якостями (енергія проростання нижче 60 %, лабораторна схожість нижче 85 %) спостерігається суттєве зниження і урожайних властивостей [3].

На підставі аналізу одержаних результатів досліджень можна зробити висновок, що виправданим способом одержання фуражного зерна в умовах Донецької області є сумісне вирощування гороху із злаковим компонентом (ячмінь або овес) у співвідношенні 50 % + 50 % від номінальної норми висіву цих культур в одновидових посівах. Це дозволяє додатково одержати до 8 ц/га збалансованого за протеїном фуражного зерна. Можливим є також вирощування гороху на насіннєві цілі в зерновій суміші із злаковим компонентом у співвідношенні 75 % + 25 %. В такий спосіб вдається отримати до 6 ц/га кондиційного насіння гороху та до 12 ц/га зерна злакового компонента.

РЕЗЮМЕ

Для увеличения производства фуражного зерна, сбалансированного по протеину, в условиях Донецкой области целесообразно применять совместные посевы гороха со злаковыми зерновыми культурами в соотношении 50 % + 50 % от номинальной нормы высева этих культур в одновидовых посевах. Возможным является выращивание гороха на семенные цели в зерновых смесях со злаковым компонентом в соотношении 75 % + 25 %.

SUMMARY

The jointed crops improvement with pea and cereals in correlation 50 % + 50 % by nominal pure seed sowing rates is expediently in the Donetsk region for fodder productivity increase. It is possible to cultivate pea seeds by jointed crops with cereal component by 75 % + 25 % of nominal seed sowing rates combination.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. ГОСТ 10842-76. Зерно. Методы определения массы 1000 зерен / Зерновые, зернобобовые и масличные культуры. Часть 1. – М.: Изд-во стандартов, 1990. – С. 7-9.
2. ГОСТ 12038-84. Семена сельскохозяйственных культур. Методы определения всхожести. Изд. официальное. – М.: Государственный комитет СССР по стандартам, 1985. – 4 с.
3. О нормативных показателях посевных качеств семян гороха. Котляров Г.Г. – «Селекция и семеноводство зернобобових культур», Орел: ВНИИЗБК, 1987. – С. 152-154.
4. Полищук А.А., Никкарь К.А. Суданко-бобовые смеси для кормового конвейера // Земледелие. – № 2. – 2005.– С.31-38.
5. Сорта и агротехника гороха (Государственная комиссия по сортоиспытанию сельскохозяйственных культур при министерстве сельского хозяйства СССР). – М.: Колос, 1964. – 351 с.

Надійшла до редакції 16.04.2007 р.

УДК 628.543

ВИБІР СОРБЕНТІВ ДЛЯ ОЧИЩЕННЯ ПОВЕРХНЕВИХ ВОД

С.П. Прохоренко

Стан водного басейну промислових регіонів України постійно погіршується за рахунок скидів в поверхневі водойми різноманітних виробничих сільськогосподарських та побутових недостатньо очищених стічних вод. Скиди в річки з малим дебітом великої кількості високомінералізованих шахтних вод практично перетворили їх на стічні канави.

Склад забруднень в поверхневих водоймах досить різноманітний, але найбільшу небезпеку створюють забруднення води сполуками органічного походження. Як відомо, велика кількість органічних сполук при знезараженні води хлором перетворюються в самі токсичні рукотворні речовини – діоксини. Це зумовлює необхідність глибокого вилучення органічних речовин перед використанням води, як джерела водопостачання для людей та тварин, а також навіть при використанні води для зрошення земляних угідь.

Приймаючи до уваги великі масштаби споживання води, використання для очищення води від органічних сполук таких традиційних сорбентів, як активоване вугілля викликає низку проблем. Це зв'язано в першу чергу з дефіцитом та значною ціною вказаних сорбентів.

Все це спонукає необхідність пошуків дешевих та недефіцитних сорбентів на базі природного вугілля. Природне вугілля є екологічно чистою, доступною та легкоутилізованою сировиною для виготовлення сорбентів. Як відомо, активоване вугілля одержують карбонізацією вуглевміщуючих матеріалів з наступною активацією.

Для одержання бажаних властивостей сорбентів очевидно необхідна деяка початкова мікропористість. Наступною вимогою для вихідної сировини є наявність в природному вугіллі структурованих компонентів, а також обмеження вмісту мінеральних речовин (зольності вугілля), які перешкоджають виділенню піролізних газів.

Одним із методів створення пористої структури сорбенту на основі вуглевміщуючих речовин є попереднє окислення [1-3]. Кисень сприяє утворенню проміжних містків розгалуження структури вуглецевих матеріалів за рахунок виникнення міжмолекулярних зв'язків. Однак надмірна кількість кисню при термообробці вугілля небажана, тому що при цьому сорбційна ємкість активованого вугілля знижується.

Активація вугілля може бути описана наступною схемою. При окисленні вугілля з пористою структурою парами води виникає активоване вугілля С:

$$C_n+mH_2O=C_{n-m}+mCO+mH_2.$$

В процесі активації збільшуються розміри існуючих мікропор, проходить розгалуження їх структури, зміцнюється їх поверхня та об'єм. Частинки вихідного матеріалу при цьому можуть розтріскуватись, обгорати. При цьому частина сировини (вихідного вугілля) буде переведена в небажану форму за рахунок розтріскування та утворення макропор.

Ступінь активації з утворенням мікро та мезопористої структури в значній мірі залежить від якості вихідного матеріалу, його метаморфізму і межує з мистецтвом.

Згідно з одержаними експериментальними результатами в деяких випадках отримана досить незначна зміна температури, швидкості її зміни та тривалості активації призводить до незворотної втрати сорбенту чи його корисних властивостей.

Для пошуків методів активації проведені дослідження з різними технологіями обробки вугілля. Основні результати експериментів наведені в таблиці 1.

Таблиця 1. Вплив активації на фізик-хімічні якості модифікованого мезопористого вугілля

№ п/п	Спосіб модифікації мезопористого вугілля	Вихід кінцевого продукту після активації, %	Питома поверхня, Sпп, $м^2/г$		Відношення Sп акт. / Sвих.
			активованого зразка	вихідного зразка	
1	Обробка ДМФА	70,37	181,9	0,1	1819
2	Обробка лугом (КОН)	16,16	216,2	0,8	270
3	Обробка водою (100°С)	53,33	230,6	2,8	82,4
4	Термічна обробка (300°С)	60,00	70,3	6,0	11,7
5	Термічна обробка (350°С)	59,10	275,0	50,3	5,47

© Прохоренко С.П.

Наведені результати підтверджують необхідність початкової поверхні (40-50 $м^2/г$), що підтверджує наведені вище міркування. Окрім цього із експериментальних даних можна зробити наступні висновки.

Обробка вихідного мезопористого вугілля органічними розчинниками супроводжується виділенням розчинних низькомолекулярних сполук із вугілля-сирця, що викликає вторинне розпушування. Виділені екстракцією речовини (сполуки гумінових кислот та бітуми) заповнюють пори, що призводить до зниження питомої поверхні мезопористого вугілля. Найбільш значне зниження питомої поверхні має місце при обробці діметилформамідом та розчином калієвого лугу.

Згідно з отриманими в цій серії дослідів результатами найбільший приріст питомої поверхні досягається при обробці вихідного вугілля, а не продуктів його модифікації (після обробки органічним розчином та калієвим лугом).

РЕЗЮМЕ

Приведены результаты исследований по выбору метода обработки природных углей с целью увеличения их сорбционной емкости.

SUMMARY

Results of the research dedicated to selection of method for processing of natural coals aimed at increase in their sorption capacity are provided.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Jannowska H., Swiatnowski A., Choma J. Active Carbon. – New York: Ellis Norwood Limited, 1991. – 228 p.
2. Дубинин М.М. Неоднородные микропористые структуры и адсорбционные свойства углеродных адсорбентов // Докл. АНСССР. – 1984. – Т.275, №6. – С.1442-1446.
3. Кинис Х., Бадер Е. Активные угли и их промышленное применение. – Л.: Химия, 1984. – 216 с.

Надійшла до редакції 20.11.2007 р.

УДК 575:633.854.54

ГЕНЕТИЧНИЙ КОНТРОЛЬ ОЗНАК ГАБІТУСУ В ЛЬОНУ ОЛІЙНОГО

О.Ю. Калініна, В.О. Лях
Запорізький національний університет

Льон олійний - важлива сільськогосподарська культура. Парадоксально, але у той час, коли в усіх європейських країнах спостерігалося нарощування темпів льоновиробництва, в Україні з 1991 року відбувалося скорочення посівних площ під льоном, зниження врожайності та якості льонопродукції [1]. Незважаючи на зростання інтересу до льону і збільшення кількості наукових досліджень культури в останнє десятиріччя [2-14], генетична детермінація багатьох його ознак, і в першу чергу, кількісних ознак габітусу рослини, до теперішнього часу є недостатньо вивченою, а одержані різними авторами результати часто суперечливі [7, 10-12].

Більшість сортів льону, що використовуються у сільському господарстві України, характеризуються незначним ступенем галуження стебла. Знання характеру успадкування ознак габітусу рослини необхідне для використання нещодавно отриманих ліній льону олійного, які є потенційними генетичними джерелами нових господарсько-цінних ознак, в якості вихідного матеріалу для селекції.

Метою досліджень було визначення генетичного контролю і характеру успадкування ознак габітусу „висота рослини", „кількість бічних пагонів" і „кількість бічних стебел" в льону олійного.

Вихідним матеріалом для проведення досліджень були три чисті лінії льону олійного, що різнилися за ознаками галуження стебла і висотою рослин, і сорт Циан, а також гібриди першого покоління, одержані від схрещувань батьківських форм за повною діалельною схемою.

Нижче наводимо коротку характеристику використаних у дослідженні зразків льону.

Л-6 – зразок з Індії, характеризується великим насінням, темно-зеленим широколанцетним листям, середньою облистяністю і низькою олійністю; віночок фіолетово-блакитний з фіолетовими жилками і блакитними пиляками, коробочка велика, галуження стебла незначне.

Циан – високоолійний сорт льону селекції Всеросійського науково-дослідного інституту олійних культур, відноситься до межеумків, характеризується зеленим забарвленням вегетативних частин рослини, середньою облистяністю, має широколанцетне листя, блакитні пелюстки віночка, пиляки і жилки. Поверхня пелюсток рівна, квітка відкрита, коробочка кулеподібна, насіння коричневе, середнє.

Багатостебловий – характеризується утворенням значної кількості бічних стебел в основі пагону; рослина зелена, середньооблистяна, листя широколанцетне, пелюстки віночка, пиляки і жилки блакитні, поверхня пелюсток рівна, квітка відкрита; коробочка кулеподібна; насіння коричневе, середнє.

Багатопагоневий – характеризується утворенням великої кількості бічних пагонів у верхній частині стебла; рослина зелена, середньооблистяна, листя широколанцетне, пелюстки віночка білі, пиляки жовті, поверхня пелюсток рівна, квітка відкрита, коробочка кулеподібна, насіння жовте, середнє.

Методи дослідження. У 2005 і 2007 рр. батьківські лінії разом із гібридами, одержаними за повною діалельною схемою, вирощували в розсаднику гібридизації. Закладання польових дослідів і облік морфологічних ознак льону здійснювали згідно з методичними вказівками ВІР [15]. У 2005 році через несприятливі погодні умови у схрещування було включено три батьківські форми, а у 2007 р. – чотири. Генетичний аналіз проводили за методом Хеймана [16, 17] з використанням програм статистичної обробки даних, розроблених В.П. Герасименком [18] в Одеському державному аграрному університеті.

Результати генетичного аналізу за Хейманом (табл. 1) свідчать, що успадкування ознак габітусу рослини в льону олійного відповідає адитивно-домінантної моделі. Перевірка достовірності відхилення об'єднаного коефіцієнта регресії від одиниці за допомогою t-критерія Стьюдента показує, що лінія регресії суттєво не відрізняється від лінії одиничного нахилу, а коефіцієнт регресії є достовірним при рівні значимості 0,05.

Генетичні параметри Хеймана вказують на переважання у контролі ознаки висоти рослини генів з неадитивними ефектами взаємодії. Незалежно від умов навколишнього середовища параметр H_1 перевищує D, та H_1/D є більшим за одиницю, що свідчить про наявність гетерозису за висотою у першому поколінні гібридів. Для цієї ознаки стабільним за роками є прояв наддомінування ($\sqrt{H_1/D}>1$).

Як свідчить аналіз наукової літератури [5, 6, 19], для культури льону ефекти домінування і наддомінування ознаки «висота рослини» є достатньо характерними.

Середня ступінь домінування являється неоднаковою в різних локусах, оскільки параметр $F/2\sqrt{D(H_1-H_2)}$ є суттєво меншим за одиницю незалежно від умов року. Нерівність оцінок H_1 і H_2 свідчить про нерівномірність розподілу домінантних і рецесивних алелів у батьківських генотипів. Однак, ця

© Калініна О.Ю., Лях В.О.

нерівномірність є незначною, оскільки оцінка $H_2/4H_1$ за своєю величиною наближається до 0,25. Від'ємний F-параметр вказує на переважання рецесивних алелів в більшості локусів.

Таблиця 1

Генетичні параметри (за Хейманом) ознаки «висота рослини» в льону олійного

Генетичні параметри	Ознака					
	Висота рослини		Кількість бічних стебел		Кількість бічних пагонів	
	2005 р.	2007 р.	2005 р.	2007 р.	2005 р.	2007 р.
D	43,43	3,05	0,81	0,49	-	1,53
H_1	214,4	74,8	6,39	11,2	-	40,55
H_2	164,8	59,9	5,39	10,6	-	33,13
H_1/D	4,94	24,54	7,9	22,79	-	26,58
$\sqrt{H_1/D}$	2,22	4,95	2,81	4,77	-	5,16
$F/2\sqrt{D(H_1-H_2)}$	-0,75	-0,36	0,86	-0,97	-	-0,95
h^2/H_2	1,76	1,78	0,95	2,96	-	1,8
F	-69,3	-4,9	1,53	-1,05	-	-1,38
$H_2/4H_1$	0,19	0,2	0,21	0,24	-	0,2
$r((W_r+V_r);x)$	0,99	0,91	-0,83	-0,52	-	0,34
B	0,66	0,64	0,59	0,59	0,17	0,53
$t_{(1-b)}$	6,84	3,09	8,54	3,62	7,85	4
$t_{(b)}$	13,2	5,3	12,28	5,23	1,57	4,47
$t_{0,05}$	11,27	4,3	11,27	4,3	11,27	4,3

Показник h^2/H_2 оцінює кількість груп генів, що контролюють ознаку і проявляють домінування. За результатами дослідження, ця величина характеризується стабільністю за роками вирощування і свідчить про контроль ознаки «висота рослини» щонайменше двома блоками генів.

Позитивні високі показники кореляції між середніми значеннями висоти рослин і відповідними показниками W_r+V_r вказують, що незалежно від року випробування домінування було спрямоване в сторону зменшення рівня ознаки. У даному випадку високостебловість контролюється рецесивними алелями. Високі значення коефіцієнтів кореляції свідчать про наявність зв'язку між середньою висотою рослин ліній і присутністю у них рецесивних алелів.

Одержані в результаті аналізу діалельних таблиць показники V_r та W_r дозволяють розташувати лінії льону згідно числу домінантних генів, якими вони володіють.

Значення V_r+W_r, отримані у 2005 і 2007 рр., свідчать про те, що найбільшу кількість домінантних алелів, які контролюють ознаку висоти рослини, серед вивчаємих ліній має Л-6, потім послідовно розташовуються Багатостебловий, Циан і Багатопагоневий, де Багатопагоневий характеризується найбільшою кількістю рецесивних алелів і, відповідно, найбільшим рівнем ознаки серед випробуваних батьківських форм.

Високий коефіцієнт кореляції дозволяє визначити теоретичні значення $W_{дом}+V_{дом}$ і $W_{рец}+V_{рец}$ для ліній, які мали би всі домінантні і рецесивні алелі. Ці показники важливі для цілей селекції на основі генів, що мають ефекти домінування.

Теоретично можна підрахувати, що гіпотетична лінія, яка мала би всі домінантні алелі вивчаємих у 2005 році батьківських форм, характеризується показником $W_{дом}+V_{дом}$=–9,06, а лінія, що містить всі рецесивні алелі – оцінкою $W_{рец}+V_{рец}$, що дорівнює 226,34. Найбільш низькорослa серед використаних для генетичного аналізу у 2005 р. лінія Багатостебловий має показник 16,59, а отже володіє не всіма домінантними алелями, присутніми в цій батьківській групі. Найбільш високорослa лінія Багатопагоневий характеризується V_r+W_r=187,75. Цей показник дещо перевищує теоретичну оцінку $W_{рец}+V_{рец}$ і свідчить, що лінія містить не всі рецесивні алелі, властиві вивчаємому набору батьків. Таким чином, існує можливість добору більш високорослих форм у наступних поколіннях гібридів за участю Багатопагоневого. Різниця ліній за показниками V_r+W_r свідчить про те, що у вивчаємому наборі є різні домінантні гени, які можна акумулювати.

Показники $W_{дом}+V_{дом}$=–27,65 і $W_{рец}+V_{рец}$=239,74 мала би лінія, що містить всі домінантні або, відповідно, всі рецесивні алелі, властиві батьківським формам, використаним для аналіза за методом Хей-

мана у 2007 році. Найбільш низькоросла лінія з випробуваних, Л-6, характеризується значенням V_r+W_r=12,78 і, таким чином, містить не всі домінантні гени, присутні в вивчаємому наборі батьківських форм. Багатопагоневий у 2007 р. мав відповідний показник 44,5, що є значно меншим $W_{рец}+V_{рец}$, таким чином, можливості добору на високорослість серед гібридів цієї групи ліній не є вичерпаними.

Результати генетичного аналізу за методом Хеймана вказують на переважання у контролі ознаки кількості бічних стєбел в льону олійного домінантних ефектів генів. Параметр H_1 перевищує D та $H_1/D>1$. Спостерігалося наддомінування ознаки в першому поколінні гібридів ($\sqrt{H_1/D}>1$).

Параметр $F/2\sqrt{D(H_1-H_2)}$ наближається до одиниці в обидва роки досліджень, що свідчить про приблизно однакову ступінь домінування в різних локусах. Оцінки H_1 і H_2 суттєво не відрізняються, а $H_2/4H_1$ за своєю величиною наближається до 0,25, вказуючи на рівномірність розподілу домінантних і рецесивних алелів у батьківських генотипів. Значення F-параметра підтверджують висновок про більш-менш рівномірний розподіл домінантних та рецесивних алелів із незначною перевагою домінантних, а його від'ємне значення у 2007 році пояснюється статистичною похибкою.

Величина h^2/H_2 варіює за роками дослідження і свідчить про контроль ознаки «кількість бічних стебел» одним-трьома блоками генів. Оскільки у 2007 р. до схеми діалельних схрещувань було включено додатковий матеріал, можна зробити припущення, що за контроль ознаки у вивчаємій групі з чотирьох батьківських форм відповідає близько трьох блоків генів.

Негативні і достатньо високі показники кореляції між середніми значеннями ознаки кількості бічних стебел і відповідними показниками W_r+V_r вказують на незалежну від року випробування спрямованість домінування в сторону збільшення рівня ознаки. Високі значення коефіцієнтів кореляції свідчать про наявність зв'язку між середньою кількістю бічних пагонів в ліній, що вивчалися, і присутністю у них домінантних алелів.

Одержані за результатами аналізу діалельних таблиць показники V_r та W_r дозволяють розташувати лінії льону згідно числу домінантних генів, якими вони володіють, у слідуючому порядку: Багатостебловий, Багатопагоневий, Л-6, Циан.

Значення V_r+W_r, отримані у 2005 і 2007 рр., свідчать про те, що найбільшу кількість домінантних алелів, які контролюють ознаку кількості бічних пагонів, серед вивчаємих ліній має Багатостебловий, найменшу – Циан.

Гіпотетична лінія, яка має всі домінантні алелі вивчаємих у 2005 році батьківських форм, буде характеризуватися показником $W_{дом}+V_{дом}$=-0,22. Найбільш розгалужена батьківська форма Багатостебловий має V_r+W_r=0,42, а отже володіє не всіма домінантними алелями, присутніми в наборі батьківських ліній. Лінія з найменшою середньою кількістю бічних стебел Циан характеризується показником 3,24, значно меншим за $W_{рец}+V_{рец}$=20. У 2007 р. різниця між оцінками гіпотетичної лінії та V_r+W_r аналізуємих ліній є менш суттєвою, однак вона доводить можливість добору більш розгалужених форм у наступних поколіннях гібридів за участю Багатостеблового без залучення до схеми нових батьківських компонентів.

Результати генетичного аналізу ознаки «кількість бічних пагонів» за Хейманом показують, що успадкування цієї ознаки відповідає адитивно-домінантній моделі: перевірка достовірності відхилення коефіцієнта регресії від одиниці за допомогою критерія Стьюдента свідчить, що коефіцієнт регресії достовірно не відрізняється від одиниці. Однак, коефіцієнт регресії, розрахований за даними 2005 р., є недостовірним, тому подальший аналіз генетичних параметрів проводили за даними 2007 р.

Параметр H_1 значно перевищує D, а показник H_1/D є більшим за одиницю, що свідчить про переважання в контролі ознаки кількості бічних пагонів в льону олійного домінантних ефектів генів. Спостерігається наддомінування ознаки у першому поколінні гібридів ($\sqrt{H_1/D}>1$).

Параметр $F/2\sqrt{D(H_1-H_2)}$ наближається до одиниці, що вказує на приблизно однакову ступінь домінування в різних локусах. Невелика різниця між H_1 і H_2 свідчить про нерівномірність розподілу домінантних і рецесивних алелів у батьківських генотипів, яка, однак, є незначною, оскільки параметр $H_2/4H_1$ за своєю величиною наближається до 0,25. Від'ємне значення F вказує на переважання рецесивних алелів.

Ознаку «кількість бічних пагонів» контролює близько двох блоків генів (h^2/H_2=1,8). Позитивний коефіцієнт кореляції між середніми значеннями ознаки кількості бічних пагонів і відповідними показниками W_r+V_r свідчить про спрямованість домінування в сторону зменшення рівня ознаки.

Одержані в результаті аналізу діалельних даних показники V_r та W_r дозволили розташувати лінії льону згідно числу домінантних генів, якими вони володіють: Л-6, Багатостебловий, Багатопагоневий, Циан.

Значення V_r+W_r, отримані у 2007 р., свідчать про те, що найбільше число домінантних алелів, які відповідають за зменшення рівня ознаки кількості бічних пагонів, серед вивчаємих ліній має Л-6, найменше – Циан.

Гіпотетична лінія, яка мала би всі домінантні алелі вивчаємих у 2007 році батьківських форм, характеризується показником $W_{дом}+V_{дом}$=7,43. Величина V_r+W_r лінії Л-6 дорівнює 6,58, а отже Л-6 володіє практично всіма домінантними алелями, що відповідають за рівень ознаки «кількість бічних пагонів» в наборі батьківських ліній. Циан та Багатопагоневий мають показники V_r+W_r, що дорівнюють 24,91 і 15,6, відповідно, та є значно меншими за величину $W_{рец}+V_{рец}$=146,9. Це свідчить про можливість добору форм з більшою кількістю бічних пагонів у поколіннях гібридів за участю Багатопагоневого та Циан без залучення до схеми схрещувань нового матеріалу.

ВИСНОВКИ

1. В контролі ознак «висота рослини», «кількість бічних стебел» і «кількість бічних пагонів» в льону олійного незалежно від умов вирощування переважають гени з домінантними ефектами взаємодії.
2. Ознаки високорослості та більшої кількості бічних пагонів в льону успадковуються як рецесивні і контролюються двома блоками генів, а ознака більшого рівня прикореневого галуження стебла є домінантною і знаходиться під контролем від одного до трьох блоків генів.
3. Домінантні та рецесивні алелі, що відповідають за ознаку «висота рослини», розподілені нерівномірно серед батьківських форм, які в порядку зменшення кількості домінантних алелів складають ряд: Л-6, Багатостебловий, Циан, Багатопагоневий. Рецесивні алелі переважають в більшості локусів.
4. Розподіл рецесивних та домінантних алелів, що контролюють ознаки галуження стебла, серед батьківських ліній льону є достатньо рівномірним. Жодна з випробуваних ліній не містить всіх домінантних або рецесивних алелів, властивих даному набору батьківських форм, що дозволяє вести добір більш розгалужених зразків льону олійного без залучення додаткових генотипів.

В подальшому необхідним вважаємо характеристику розгалужених форм льону за комбінаційною здатністю, включення до генетичного аналізу більшої кількості батьківських ліній з контрастними ознаками галуження стебла і висоти рослини, а також проведення індивідуальних доборів трансгресивних за ознаками габітусу форм з гібридних популяцій.

РЕЗЮМЕ

Изучен характер генетического контроля признаков «высота растения», «количество боковых побегов» и «количество боковых стеблей» у льна масличного. Исходным материалом исследования были 3 линии и 1 сорт льна, а также гибриды, полученные по полной диаллельной схеме. Генетический анализ по методу Хеймана показал, что в контроле признаков габитуса льна масличного независимо от условий выращивания преобладают гены с доминантными эффектами взаимодействия, признаки высокорослости и большего количества боковых побегов наследуются как рецессивные и контролируются двумя блоками генов, а признак большей степени прикорневого ветвления стебля является доминантным и находится под контролем от одного до трёх блоков генов.

SUMMARY

The type of genetic control of the traits "plant height", "the number of lateral shoots" and "the number of lateral stems" has been studied in oil flax. The material of the investigation was 3 lines and 1 variety of flax, as well as hybrids obtained under complete diallel scheme. Genetic analysis according to Hayman's method has shown the prevalence of genes with dominant effects of interaction in habitus traits control in oil flax. The traits of higher plant height and more numerous lateral shoots are recessive and are under the control of 2 blocks of genes, whereas the trait of more numerous lateral stems is a dominant trait and is controlled by 1 to 3 blocks of genes.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Кругла Н.А. Історія розвитку льонарства в Україні (друга половина XIX - XX століття): Автореф. дис. ... канд. іст. наук: 07.00.07 / Центр дослідж. наук.-техн. потенціалу та історії науки ім. Г.М.Доброва НАНУ. – К., 2002. – 20 с.
2. Brutch N.B., Kutuzova S.N., Porohovinova E.A. Genetic Collection of Flax in VIR Department of Industrial Crops //Best fibrous plants today and tomorrow. 28-30 September 1998. – St. Petersburg, 1998/2. – P. 45–49.
3. Ганганов В.М. Особливості успадкування кількісних ознак льону-довгунця: Автореф. дис. ... канд. с.-г. наук: 06.01.05 / Інститут землеробства УААН. – К., 1999. – 20 с.
4. Генетическая коллекция вида *Linum usitatissimum* L. (каталог) / В.А. Лях, Л.Ю. Мищенко, И.А. Полякова; Под ред. В.А. Ляха. – Запорожье: Институт масличных культур УААН, 2003. – 60 с.
5. Грига О.А. Наследование ряда количественных признаков льна культурного и их селекционное использование: Автореф. дис. ... канд. биол. наук: 03.00.15 / УНИИ земледелия УААН. – К., 1995. – 28 с.
6. Кандиба Н.М. Мінливість та успадкування основних господарсько-цінних ознак у міжсортових гібридів льону-довгунця: Автореф. дис. ... канд. с.-г. наук: 06.01.05 / Інститут рослинництва ім. В.Я. Юр'єва УААН. – Харків, 2006. – 19 с.
7. Логінов М.І., Чучвага В.І., Муковоз В.Ю., Козуб Л.М. Національна колекція льону-довгунця і її використання в селекції //Селекція, технологія вирощування і збирання луб'яних культур: Зб. наук. праць Інституту луб'яних культур. – Глухів, 2001. – №2. – С. 21–24.

8. Пороховинова Е.А. Создание и изучение генетической коллекции льна (*Linum usitatissimum* L.) //Автореф. дис. ... канд. биол. наук: 03.00.15 / ВИР им. Н.И. Вавилова. – СПб, 2002. – 18 с.
9. Пашина Л.В. Ідентифікація високостеблових форм льону методом діалельного аналізу //Селекція і насінництво: Республіканський міжвідомчий тематичний наук. зб. – К.: „Урожай", 1991. – Вип. 70. – С. 22–26.
10. Mahto J.L., Singh S.N. Genetic diversity and stability in linseed //Gujarat Agr. Univ. Res. J. – 1996. – 22, №1. – P. 14–18.
11. Singh, N., Dikshit, N.N. Heritability and genetic advance in linseed (*Linum usitatissimum* L.) //Indian J. Agr. Sc. – 1988. – №58, 7. – P. 552–553.
12. Srivastava G.C., Tomar S.S., Deshmukh P.S., Mehra R.B. Effect of environmental factors on correlation coefficient between different morphological parameters of yield in linseed (*Linum usitatissimum* L.) //Indian J. Plant. Physiol. – 1981. – Vol. 24, № 2. – P. 97–103.
13. Saeidi G., Rowland G. Seed colour and linolenic acid effects on agronomic traits in flax //Canadian J. Plant Sc. – №79. – 1999. – P. 56–64.
14. Изучение коллекции льна (*Linum usitatissimum* L.): Метод. указания //Сост.: С.Н. Кутузова, Г.Г. Питько. – Л.: ВИР, 1988. – 30 с.
15. Hayman B.I. The theory and analysis of diallel crosses //Genetics. – 1956. – V. 39. – №39. – P. 789–809.
16. Турбин Н.В., Хотылева Л.В., Тарутина Л.А. Диаллельный анализ в селекции растений. – Минск: Наука и техника, 1974. – 184 с.
17. Дремлюк Г.К., Герасименко В.Ф. Приёмы анализа комбинационной способности и ЭВМ-программы для нерегулярных скрещиваний. – Одесса: СГИ, 1992. – 144 с.

Надійшла до редакції 20.11.2007 р.