

МОЛОДОЙ

ISSN 2072-0297

JOURNAL OF
NATURAL
HISTORY

УЧЁНЫЙ
научный журнал

An international journal of systematics, interactive biology, and biodiversity, previously the *Annals & Magazine of Natural History*, founded in 1841

Volume 39

Taylor & Francis
Taylor & Francis Group

9
2015
Часть I

ISSN 2072-0297

Молодой учёный

Научный журнал

Выходит два раза в месяц

№ 9 (89) / 2015

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

Главный редактор: Ахметова Галия Дуфаровна, доктор филологических наук

Члены редакционной коллегии:

Ахметова Мария Николаевна, доктор педагогических наук

Иванова Юлия Валентиновна, доктор философских наук

Каленский Александр Васильевич, доктор физико-математических наук

Куташов Вячеслав Анатольевич, доктор медицинских наук

Лактионов Константин Станиславович, доктор биологических наук

Сараева Надежда Михайловна, доктор психологических наук

Авдеюк Оксана Алексеевна, кандидат технических наук

Айдаров Оразхан Турсункожаевич, кандидат географических наук

Алиева Тарана Ибрагим кызы, кандидат химических наук

Ахметова Валерия Валерьевна, кандидат медицинских наук

Брезгин Вячеслав Сергеевич, кандидат экономических наук

Данилов Олег Евгеньевич, кандидат педагогических наук

Дёмин Александр Викторович, кандидат биологических наук

Дядюн Кристина Владимировна, кандидат юридических наук

Желнова Кристина Владимировна, кандидат экономических наук

Жуйкова Тамара Павловна, кандидат педагогических наук

Игнатова Мария Александровна, кандидат искусствоведения

Коварда Владимир Васильевич, кандидат физико-математических наук

Комогорцев Максим Геннадьевич, кандидат технических наук

Котляров Алексей Васильевич, кандидат геолого-минералогических наук

Кузьмина Виолетта Михайловна, кандидат исторических наук, кандидат психологических наук

Кучерявенко Светлана Алексеевна, кандидат экономических наук

Лескова Екатерина Викторовна, кандидат физико-математических наук

Макеева Ирина Александровна, кандидат педагогических наук

Матроскина Татьяна Викторовна, кандидат экономических наук

Мусаева Ума Алиевна, кандидат технических наук

Насимов Мурат Орленбаевич, кандидат политических наук

Прончев Геннадий Борисович, кандидат физико-математических наук

Семахин Андрей Михайлович, кандидат технических наук

Сенюшкин Николай Сергеевич, кандидат технических наук

Ткаченко Ирина Георгиевна, кандидат филологических наук

Яхина Асия Сергеевна, кандидат технических наук

На обложке изображена Мэри Эннинг (1799–1847) — британский коллекционер окаменелостей и палеонтолог-любитель, известная целым рядом открытий, в основном, в области морской фауны юрского периода.

Статьи, поступающие в редакцию, рецензируются. За достоверность сведений, изложенных в статьях, ответственность несут авторы. Мнение редакции может не совпадать с мнением авторов материалов. При перепечатке ссылка на журнал обязательна. Материалы публикуются в авторской редакции.

АДРЕС РЕДАКЦИИ:

420126, г. Казань, ул. Амирхана, 10а, а/я 231. E-mail: info@moluch.ru; http://www.moluch.ru/.

Учредитель и издатель: ООО «Издательство Молодой ученый»

Тираж 1000 экз.

Отпечатано в типографии издательства «Молодой ученый», г. Казань, ул. Академика Арбузова, д. 4

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

Свидетельство о регистрации средства массовой информации ПИ № ФС77-38059 от 11 ноября 2009 г.

Журнал входит в систему РИНЦ (Российский индекс научного цитирования) на платформе elibrary.ru.

Журнал включен в международный каталог периодических изданий «Ulrich's Periodicals Directory».

Ответственные редакторы:

Кайнова Галина Анатольевна

Осянина Екатерина Игоревна

Международный редакционный совет:

Айрян Заруи Геворковна, кандидат филологических наук, доцент (Армения)

Арошидзе Паата Леонидович, доктор экономических наук, ассоциированный профессор (Грузия)

Атаев Загир Вагитович, кандидат географических наук, профессор (Россия)

Борисов Вячеслав Викторович, доктор педагогических наук, профессор (Украина)

Велковска Гена Цветкова, доктор экономических наук, доцент (Болгария)

Гайич Тамара, доктор экономических наук (Сербия)

Данатаров Агахан, кандидат технических наук (Туркменистан)

Данилов Александр Максимович, доктор технических наук, профессор (Россия)

Досманбетова Зейнегуль Рамазановна, доктор философии (PhD) по филологическим наукам (Казахстан)

Ешиев Абдыракман Молдоалиевич, доктор медицинских наук, доцент, зав. отделением (Кыргызстан)

Игисинов Нурбек Сагинбекович, доктор медицинских наук, профессор (Казахстан)

Кадыров Кутлуг-Бек Бекмурадович, кандидат педагогических наук, заместитель директора (Узбекистан)

Кайгородов Иван Борисович, кандидат физико-математических наук (Бразилия)

Каленский Александр Васильевич, доктор физико-математических наук, профессор (Россия)

Козырева Ольга Анатольевна, кандидат педагогических наук, доцент (Россия)

Куташов Вячеслав Анатольевич, доктор медицинских наук, профессор (Россия)

Лю Цзюань, доктор филологических наук, профессор (Китай)

Малес Людмила Владимировна, доктор социологических наук, доцент (Украина)

Нагервадзе Марина Алиевна, доктор биологических наук, профессор (Грузия)

Нурмамедли Фазиль Алигусейн оглы, кандидат геолого-минералогических наук (Азербайджан)

Прокопьев Николай Яковлевич, доктор медицинских наук, профессор (Россия)

Прокофьева Марина Анатольевна, кандидат педагогических наук, доцент (Казахстан)

Ребезов Максим Борисович, доктор сельскохозяйственных наук, профессор (Россия)

Сорока Юлия Георгиевна, доктор социологических наук, доцент (Украина)

Узаков Гулом Норбоевич, кандидат технических наук, доцент (Узбекистан)

Хоналиев Назарали Хоналиевич, доктор экономических наук, старший научный сотрудник (Таджикистан)

Хоссейни Амир, доктор филологических наук (Иран)

Шарипов Аскар Калиевич, доктор экономических наук, доцент (Казахстан)

Художник: Шишков Евгений Анатольевич

Верстка: Бурьянов Павел Яковлевич

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

Артемова М. В., Морщинина Д. А. Математическая модель винтов для фиксации вертельных переломов бедренной кости	1
Ибрагимов А. А. Модифицированное уравнение Беллмана для эргодических марковских цепей с доходами	5
Костырко С. А., Шувалов Г. М. Влияние поверхностного напряжения на морфологическую устойчивость многослойного пленочного покрытия при поверхностной диффузии	14
Расулов Т. Х., Бахронов Б. И. О спектре тензорной суммы моделей Фридрихса	17
Расулов Т. Х., Дилмуродов Э. Б. Связь между числовым образом и спектром модели Фридрихса с двумерным возмущением	20
Расулов Т. Х., Мухитдинов Р. Т. Уравнение Вайнберга для собственных функций модельного оператора, ассоциированного с системой трех частиц на решетке	23
Расулов Т. Х., Рахмонов А. А., Турдиев Х. Х. Об одном свойстве уравнения Фаддеева для модельного трехчастичного дискретного оператора Шредингера	26
Расулов Т. Х., Худаяров С. С. О спектре дополнения Шура одной операторной матрицы	29
Расулов Т. Х., Худаяров С. С. Числовой образ линейных операторов: основные свойства и примеры	33

Расулов Т. Х., Ширинова М. У. Об одном применении леммы Морса	36
Расулов Т. Х. О достаточном условии конечности числа собственных значений двухканальной молекулярно-резонансной модели	40
Тиллабоев Ё. К., Хакимов Р. М., Холмирзаев И. А. Организация приближённого решения уравнений состояния электрической цепи в MathCAD	44

ФИЗИКА

Зайнабидинов С. З., Маткаримова Н. Б., Мадаминов Х. М., Эрматов Ш. А. Рентгеновские спектры многозарядных ионов в высокотемпературной лазерной плазме	48
Зайнабидинов С. З., Саидов А. С., Усмонов Ш. Н., Мадаминов Х. М., Курбанов А. О., Маткаримова Н. Б. Пути повышения эффективности солнечных элементов	53
Степанов Е. М. Исследование фотолюминесценции коллоидных квантовых точек на основе халькогенидов металлов	56

ХИМИЯ

Абдрахманова Г. А. Синтетические моющие средства: польза и вред	60
Абдурахмонов Б. М., Алимкулов С. О., Эшматов А. Б., Алиева Р. А. Эффективное использование отходов химических опытов на лабораторных занятиях	62

Ананьева М. В., Зыков И. Ю.
Лазерное инициирование композитов гексоген — алюминий65

Аскарова Г. М., Байрамов М. Р., Агаева М. А., Мехтиева Г. М., Алиева С. Г.
Функциональнозамещенные производные алкенилфенолов в качестве ингибиторов коррозии стали СТ. 3 70

Бозорова Н. Х., Рахматов Х. Б., Караев А. Т.
Сорбция паров воды и поровые характеристики полученных сополимеров71

Гаджиева С. Р., Кадырова Э. М., Алиева Т. И., Рафиева Г. Л., Рустамова У. Н.
Циклические металлоорганические производные ферроцена и цимантрена74

Исмоилова Х. Д., Бозорова Н. Х.
Характеристика сетчатой структуры сополимеров акрилонитрила с гексагидро-1,3,5-триакрилилтриазином 80

Кутлимуротова Н. Х., Мустафакулова Л. О., Турдикулов И. У., Жумартова У. У.
Потенциометрическое титрование Cu (II) раствором ЭДТА82

Роик Б. О.
Разработка метода ВЭЖХ для идентификации замещенных 1,2,4-триазинов84

Ротарь О. В., Ротарь В. Г., Пименова А. С., Искрижицкий А. А.
Красители для полиуретана91

Рузиева З. Т., Сафаров У. Б., Хидирова Ю. Х., Нормаматов Ф.
Исследование процесса конверсии сульфата натрия нитратом и нитритом кальция93

Федорова О. Ю., Волгина Т. Н.
Окисление фенола под действием окислительной системы генерируемой in situ в водных растворах серной кислоты96

Хайбуллина Г. Р.
Природные пищевые красители, их синтетические аналоги и влияние на организм99

ИНФОРМАТИКА

Алексеев Н. Л.
Вычисление «неберущихся» интегралов с помощью электронных таблиц Microsoft Excel 102

Горин А. В.
Перспективы применения систем иммерсивного телеприсутствия и робототехнических комплексов в системе РСЧС и ГО МЧС России 107

Григорьев И. В., Мустафина С. А.
Реализация численного алгоритма метода вариаций в пространстве управлений110

Дупленко А. Г.
Этапы и тенденции развития геоинформационных систем 115

Елезов Д. А., Тупицин А. В.
Нечеткие алгоритмы оценки физической и технической защищенности объектов распределенного предприятия 117

Жетимекова Г. Ж.
Распознавания для вариантных и инвариантных образов 120

Краснова Т. И., Ванюшин И. С.
Machine translation error analysis 124

Максутова А. Т.
Increasing contact center efficiency through automatic dialers 126

Розыходжаева Д. А., Розыходжаева Г. А.
Роль проблемно-ориентированных информационных систем для поддержки принятия решения в современной эхокардиографической диагностике 129

Сланбекова А. Е., Каменова Ш. К., Хасенова А. А.
Эффективное применение программы 3D Max в учебном процессе 131

МАТЕМАТИКА

Математическая модель винтов для фиксации вертельных переломов бедренной кости

Артемова Мария Владиславовна, студент;
 Морщинина Диана Алексеевна, кандидат физико-математических наук, доцент
 Санкт-Петербургский государственный университет

1. Введение. Одной из распространенных травм опорно-двигательного аппарата является перелом шейки бедра. В зависимости от его особенностей назначается консервативное (гипс) или оперативное лечение [1]. В последнем случае проводится остеосинтез при помощи различного вида фиксаторов. Довольно частым является применение трех спонгиозных винтов. Они представляют собой стержень (длиной 25–100 мм) с резьбовой частью (длиной 16–32 мм) диаметром 4,5–6,5 мм. Как правило, винты изготавливаются из титановых сплавов [1].

Математическая модель винтов построена на основе теории изгиба балок [2-4].

2. Анализ напряженно-деформированного состояния винта. Рассмотрим в декартовой системе координат $X Y Z$ балку длиной l с круговым сечением диаметра d , загруженную равномерно распределенной нагрузкой q (рис. 1).

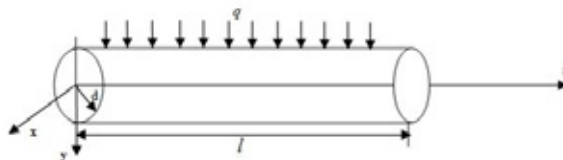


Рис. 1.

Дифференциальное уравнение изогнутой оси балки имеет вид [3]:

$$EI \frac{d^4 v}{dz^4} = q, \tag{1}$$

где v — прогиб; M — проекция изгибающего момента в точке z на ось oX ; I — момент инерции площади поперечного сечения балки относительно его центральной оси, параллельной оси oX ; E — модуль Юнга.

Нормальное напряжение при изгибе выражается равенством [3]:

$$\sigma = \frac{M_1 y}{I}. \tag{2}$$

Максимальные напряжения определяются по формуле [4]:

$$\sigma_{\max} = \frac{M_{\max}}{W}, \tag{3}$$

где W — момент сопротивления сечения при изгибе.

Для кругового поперечного сечения

$$W = \frac{\pi d^3}{32}. \tag{4}$$

В данной работе проводится исследование напряженно-деформированного состояния балки, зашпеленной на одном конце под действием равномерно-распределенной нагрузки q_1 и q_2 (рис. 2, рис. 3).

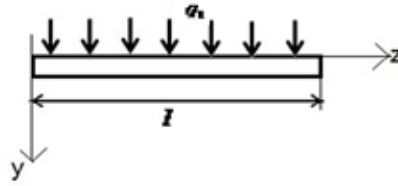


Рис. 2

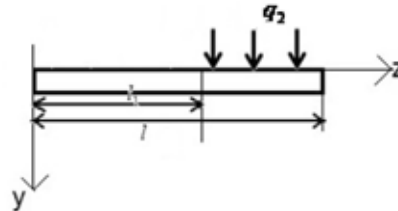


Рис. 3

Краевые условия имеют вид:

$$v(0) = v'(0) = v''(l) = v'''(l) = 0. \tag{5}$$

Интегрируя уравнение (1), получаем функцию прогиба в первом случае:

$$v_1 = \frac{1}{EI} \left(\frac{q_1 z^4}{24} + A \frac{z^3}{6} + B \frac{z^2}{2} + Cz + D \right).$$

Принимая во внимание краевые условия (5), имеем

$$v_1 = \frac{q_1 z^2 l^2}{24EI} \left(\frac{z^2}{l^2} - \frac{4z}{l} + 6 \right).$$

На основе формул (2) — (4) находим выражения для напряжения

$$\sigma_1 = \frac{16q_1 l^2 \left(1 - \frac{z}{l}\right)^2}{\pi d^3},$$

$$\sigma_{1\max} = \frac{32M_1}{\pi d^3} = \frac{16q_1 l^2}{\pi d^3}. \tag{6}$$

Рассмотрим теперь балку, нагруженную равномерно распределенной нагрузкой q_2 на отрезке $[l_1, l]$ (рис. 2). Этот случай особенно интересен, так как основная нагрузка приходится на головку бедра. Функции прогиба и напряжения могут быть найдены аналогичным способом, либо с помощью операционного метода [5]. Последний представлен ниже.

Дифференциальное уравнение изгиба балки в этом случае имеет вид:

$$EIv_2^{(4)}(z) = q_2 e(z - l_1), \tag{7}$$

где $e(z - l_1)$ — единичная функция или функция Хевисайда [6].

Применяя к уравнению (7) преобразование Лапласа [5], получим:

$$V_2(p) = \frac{v_2(0)}{p} + \frac{v_2'(0)}{p^2} + \frac{v_2''(0)}{p^3} + \frac{v_2'''(0)}{p^4} + \frac{1}{EI} \frac{q}{p^5} e^{-p(l-l_1)},$$

где $V_2(p) = \int_0^\infty e^{-pt} v_2(t) dt.$

Этому изображению соответствует оригинал

$$v_2(z) = v_2(0) + v_2'(0)z + \frac{v_2''(0)z^2}{2} + \frac{v_2'''(0)z^3}{3!} + \frac{1}{EI} \frac{q}{4!} (z-l_1)^4 e(z-l_1).$$

Учитывая краевые условия (5) и осуществляя необходимые преобразования, находим:

$$v_2 = \frac{q_2}{24EI} ((z-l_1)^4 e(z-l_1) - 4z^3(l-l_1) + 6z^2(l^2-l_1^2)),$$

Напряжения, возникающие в сечении балки, будут определяться по формуле

$$\sigma_2 = \frac{16q_2((z-l_1)^2 e(z-l_1) - 2z(l-l_1) + (l^2-l_1^2))}{\pi d^3},$$

$$\sigma_{2\max} = \frac{16q_2(l^2-l_1^2)}{\pi d^3}.$$

Проведем сравнительный анализ решений рассмотренных задач (рис. 2, рис. 3). Для этого введем функции:

$$v_1^*(z) = \frac{24EI}{q_1 l} v_1(z), \quad v_2^*(z) = \frac{24EI}{q_2(l-l_1)} v_2(z), \quad \sigma_1^*(z) = \frac{\sigma_1(z)}{q_1 l}, \quad \sigma_2^*(z) = \frac{\sigma_2(z)}{q_2(l-l_1)}.$$

Полагая в них $l_1 = \frac{l}{b}$, $q_2 = bq_1$, имеем

$$v_1^*(z) = z^2 l \left(\frac{z^2}{l^2} - \frac{4z}{l} + 6 \right),$$

$$v_2^*(z) = \frac{1}{b(l-\frac{l}{b})} \left[(z-\frac{l}{b})^4 e(z-\frac{l}{b}) - 4z^3(l-\frac{l}{b}) + 6z^2(l^2 - (\frac{l}{b})^2) \right],$$

$$\sigma_1^*(z) = \frac{16l(1-\frac{z}{l})^2}{\pi d^3}, \quad \sigma_2^*(z) = \frac{16((z-l_1)^2 e(z-l_1) - 2z(l-l_1) + (l^2-l_1^2))}{b(l-l_1)\pi d^3}.$$

На рис. 4–6 представлены графики функций $v_1^*(z)$, $v_2^*(z)$, $\sigma_1^*(z)$, $\sigma_2^*(z)$.

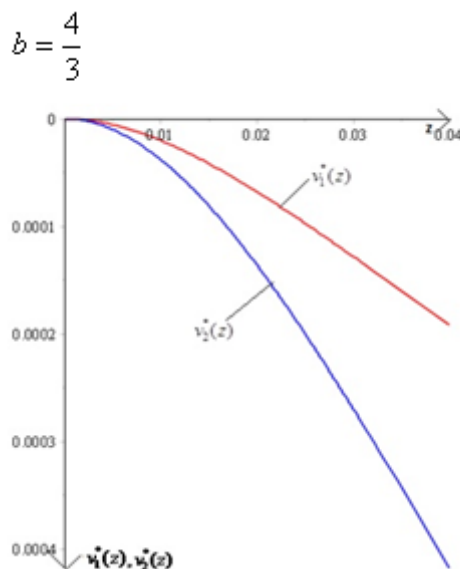


Рис. 4

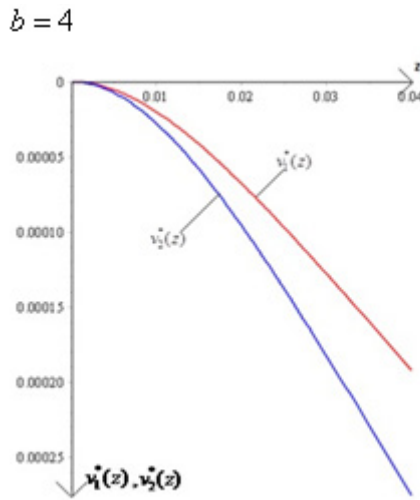


Рис. 5

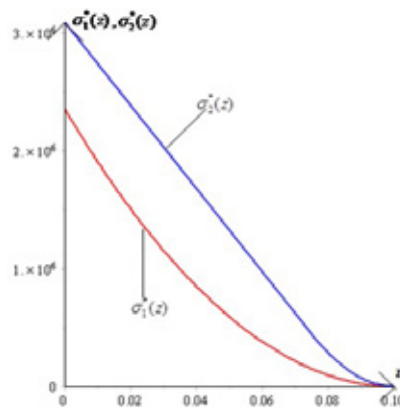


Рис. 6

Анализируя полученные результаты, можно заметить, что максимальные значения прогиба балки достигаются на ее конце $z = l$, на противоположном ($z = 0$) возникают наибольшие напряжения, причем их величины во втором случае (рис. 3) больше, чем в первом (рис. 2). При $l_1 \rightarrow l$ различия между графиками функций уменьшаются, а при увеличении длины (диаметра винта) наблюдается рост (убывание) их значений.

3. Определение геометрических параметров винта в зависимости от нагрузки. Согласно Х.А. Янсону [7], показатели нагрузки на тазобедренный сустав в различных случаях составляют:

- 1) при опоре на обе ноги — $0,3P$;
- 2) при опоре на оперированную ногу — $2,4P$;
- 3) при передвижении в обычном темпе по ровной поверхности — $2P$;
- 4) при подъеме и спуске по наклонной поверхности — $2,5P$;
- 5) при быстрой ходьбе — $4,3P$.

Здесь P — вес тела без опорной конечности.

Система бедро+голень+стопы составляет примерно 36% массы человека [8].

Определим диаметр винта d , применяемого при фиксации вертельного перелома бедренной кости, исходя из характеристик материала. Наиболее предпочтительным для изготовления фиксаторов является титановый сплав $\sigma_{np} = 900$ МПа [1].

В соответствии с формулой (6) для максимальных напряжений получаем:

$$d = \sqrt[3]{\frac{16Pl}{\sigma_{np}\pi}}, P = ql.$$

На рис. 7 приведены графики зависимости диаметра винта d от его длины l в случаях 1-5:

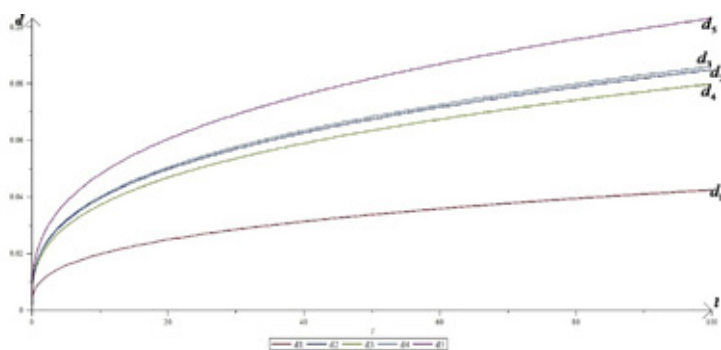


Рис. 7

На основе полученных результатов следует отметить, что при фиксации вертельного перелома бедренной кости необходимо учитывать индивидуальные особенности пациента (различные типы нагрузки). При высокой активности или большой массе рекомендуется использовать винт большего диаметра.

Литература:

1. Анкин, Л. Н., Анкин Н. Л. Травматология. Европейские стандарты. М.: Медэкспресс-информ, 2005. 496 с.
2. Папкович, П. Ф. Труды по строительной механике корабля. Л.: Судпрогиз, Том 1, 1962. 576 с.
3. Короткин, Я. И., Локшин А. З., Сиверс Н. Л. Изгиб и устойчивость стержней и стержневых систем (строительная механика корабля). М.: Машгиз, 1953. 517 с.
4. Беляев, Н. М. Сопротивление материалов. М.: ФИЗМАТЛИТ, 1965. 856 с.
5. Даль, Ю. М. О решении некоторых дифференциальных уравнений механики операционным методом // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 10. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления, 2013, Вып. 4, с. 3–9
6. Лаврентьев, М. А., Шабат Б. В. Методы теории функции комплексного переменного. М.: Наука, 1965. 737 с.
7. Янсон, Х. А., Биомеханика нижней конечности человека. Рига: Зинатне, 1975. 324 с.
8. Дубровский, В. И., Федорова В. Н. Биомеханика: учебник для средних и высших учебных заведений. М.: ВЛАДОС-ПРЕСС, 2003. 672 с.

Модифицированное уравнение Беллмана для эргодических марковских цепей с доходами

Ибрагимов Абдуфаттох Абдурашидович, кандидат технических наук, доцент
Ташкентский институт ирригации и мелиорации (Узбекистан)

Управляемые марковские цепи с одним эргодическим классом и, возможно, с невозвратными состояниями изучаются с помощью операторов сжатия. Строится модифицированное уравнение Беллмана, позволяющее найти оптимальные стратегии не только на конечном, но и бесконечном горизонте. Представляется IV_m -метод динамического программирования, охватывающий как частный случай модифицированного уравнения Беллмана и итерационного алгоритма Ховарда. На его основе разрабатываются эффективные итерационные алгоритмы нахождения оптимальных стратегий на бесконечном горизонте.

Введение

Пусть задана управляемая марковская цепь с критерием средних доходов за единицу времени, удовлетворяющая условиям:

- 1) любая стационарная стратегия задает марковскую цепь с одним эргодическим классом и, возможно, с невозвратными состояниями;
- 2) каждый эргодический класс не имеет циклических подклассов.

Такую управляемую марковскую цепь назовем *регулярной марковской моделью* и обозначим RMM. Этот случай, по существу, является основным, заслуживающим внимания с точки зрения задач, встречающихся на практике.

В [1, 2] RMM рассматривается как частный случай общего марковского процесса принятия решений (структура цепи может меняться в зависимости от стратегии).

В настоящей работе, опираясь на одно замечательное свойство неотрицательно регулярной цепи Маркова (теорема 1), строятся операторы сжатия, неподвижные точки которых определяют оптимальное значение критерия качества стратегий RMM. С их помощью:

- 1) строится модифицированное уравнение Беллмана, позволяющее найти оптимальные стратегии RMM не только на конечном, но и бесконечном горизонте управления,
- 2) изучается вопрос существования стационарной оптимальной стратегии RMM,
- 3) определяются оптимизационная схема последовательных приближений, которая порождает целый класс итерационных алгоритмов, позволяющих решать задачи оптимизации достаточно больших размерностей.

Аналогичная схема оптимизации использована в работах [3–6], применительно к управляемым марковским цепям с поглощением, марковским играм с переоценкой, рекурсивным играм, регулярным марковским играм.

Из результатов данной работы получается утвердительный ответ на вопрос, поставленный в книге [7, с. 25]: можно ли схему оптимизации, основанной на принципе сжатых отображений, эффективно распространить на модель динамического программирования со средним доходом за единицу времени.

1. Постановка задачи

Пусть имеется управляемая марковская цепь с конечным множеством состояний $S = \{1, 2, \dots, N\}$ и конечными множествами решений $U_i = \{1, 2, \dots, k_i\} (i \in S)$.

Элемент $f = [u_i] (i \in S)$ из пространства $F = U_1 \times U_2 \times \dots \times U_N$, где $u_i \in U_i$, называется решающей функцией. Последовательность решающих функций $\pi = (f_1, f_2, \dots, f_n, \dots)$ называется марковской стратегией, где f_n — решающая функция, применяемая на n -м шаге, а $u_i(n)$ (i -й элемент вектора f_n) является решением, принимаемым в состоянии i . Стратегия вида $f^\infty = (f, f, \dots, f, \dots)$ называется стационарной. Для каждой решающей функции $f \in F$ заданы матрица вероятностей переходов $P(f) = \|p_{ij}^k\| (i, j \in S)$ размера $(N \times N)$ и $(N \times 1)$ -мерный вектор доходов $r(f) = [r_i^k] (i \in S)$, где $k = u_i \in U_i$. Обозначим: Π — множество марковских стратегий, F^∞ — множество стационарных стратегий.

Для управляемых марковских цепей с конечным горизонтом n цель управления состоит в максимизации $(N \times 1)$ -мерного вектора суммарных средних доходов за n шагов

$$V^n(\pi) = \sum_{t=0}^{n-1} P_t(\pi) r(f_{t+1}) \quad (1)$$

в множестве стратегий $\Pi = \{\pi\}$, где $P_t(\pi) = P(f_1)P(f_2)\dots P(f_t)$, $P_0(\pi) = I$ (I — единичная матрица размера $N \times N$); i -й элемент $v_i^n(\pi)$ вектора $V^n(\pi)$ отвечает начальному состоянию процесса $i \in S$.

В случае, когда горизонт управления бесконечен, в качестве критерия оптимальности выбирается вектор средних доходов за единицу времени

$$\Gamma(\pi) = \liminf_n \frac{V^n(\pi)}{n} \text{ при } n \rightarrow \infty. \quad (2)$$

Здесь начальному состоянию $i \in S$ отвечает i -й элемент $g_i(\pi)$ вектора $\Gamma(\pi)$.

Стратегия $\pi^* \in \Pi$ оптимальна, если $\Gamma(\pi^*) \geq \Gamma(\pi)$ для всех $\pi \in \Pi$.

Наша цель — решить задачу оптимального управления регулярных марковских моделей с вектором средних доходов за единицу времени $\Gamma(\pi)$ с помощью принципа сжатых отображений и функционального уравнения Беллмана, и разработать эффективные методы нахождения оптимальных решений (π^* , $\Gamma(\pi^*)$) таких моделей.

3. Вспомогательные результаты

Обозначим \mathbb{V}^N множество N -мерных вектор столбцов. Вектор из \mathbb{V}^N , все элементы которого равны единице, обозначим $\mathbf{1}$ (векторная единица).

При фиксированной стационарной стратегии $f^\infty \in F^\infty$ RMM характеризуется положительной или неотрицательной регулярной цепью Маркова с матрицей вероятностей перехода $P(f)$. Согласно теории цепей Маркова [8] в этом случае существует предельная матрица $P^*(f) = \lim_{n \rightarrow \infty} P^n(f)$, состоящая из одинаковых строк $\alpha(f) = [\alpha_i(f)] (i \in S) \in \mathbb{V}^N$. Иначе говоря, $P^*(f) = \mathbf{1}\alpha(f)$. Вектор $\alpha(f)$ есть финальное распределение вероятностей, удовлетворяющий уравнению $\alpha(f) = \alpha(f)P(f)$ при условии $\alpha(f)\mathbf{1} = 1$. Отсюда и из (2) следует, что

$$\Gamma(f) = P^*(f)r(f) = \mathbf{1}\alpha(f)r(f) = g(f)\mathbf{1}, \quad (3)$$

где $g(f)$ — скалярная величина (называется прибыль).

Таким образом, для RMM в множестве стационарных стратегий F^∞ предельный средний доход не зависит от начального состояния $i \in S$, т. е. $g_i(f) = g(f)$ для всех $i \in S$.

Лемма 1. Для RMM справедливо равенство $V^n(f^\infty) = ng(f)1 + v(f) + \varepsilon_n(f)$, $n \geq 1$, где $\varepsilon_n(f) \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$ и $v(f) = \left\{ [I - P(f) + P^*(f)]^{-1} - P^*(f) \right\} r(f)$.

Доказательство (см. [2], с. 42).

Элементы $v_i(f)$, $i \in S$ вектора $v(f)$ называются весами, а величины $v_i(f) - v_s(f)$, $i \in S \setminus \{s\}$, где s произвольный элемент S — относительными весами.

В [1, 2] RMM рассматривается как частный случай общего марковского процесса принятия решений (при фиксированной стратегии f^∞ множество состояний разбивается на несколько эргодических множеств и невозвратное множество, которые могут меняться в зависимости от стратегии f^∞). В этом случае итерационный алгоритм Ховарда приобретает такой вид (см. [2, с. 82]):

1. Для выбранной решающей функции $f = [u_i](i \in S) \in F$ решить систему уравнений

$$v_i + g = r_i^k + \sum_{j \in S} p_{ij}^k v_j, i \in S \tag{4}$$

относительно весов $v_i = v_i(f)$, $i \in S$ и прибыли $g = g(f)$ полагая $v_s = 0$ для некоторого эргодического состояния $s \in S$, где $k = u_i$.

2. Используя найденные значения g и v_i , $i \in S$, найти при каждом $i \in S$ решение

$$k' = \operatorname{arg} \max_{k \in U_i} \left[r_i^k + \sum_{j \in S} p_{ij}^k v_j \right]$$

и принять его за новое решение в состоянии i . Здесь следует соблюдать **правило выбора решения**: если старое решение в i -м состоянии приносит величине критерия столь же большое значение, как и любое другое решение, необходимо оставить старое решение неизменным. Процедура заканчивается, когда в двух последовательных итерациях будут получены одинаковые решающие функции, в противном случае можно перейти к пункту 1.

Решающую роль в изучении RMM играет следующая

Теорема 1 [6, 9]. Пусть марковская цепь, задаваемая матрицей $P = \|p_{ij}\|$ ($1 \leq i, j \leq N$), положительно или неотрицательно регулярна. Пусть Q_s — матрица размера $(N-1) \times (N-1)$, полученная из матрицы P вычитанием произвольной s -ой строки из оставшихся $N-1$ строк и вычеркиванием s -ой строки s -го столбца. Тогда спектральный радиус $\rho(Q_s)$ матрицы Q_s меньше единицы.

4. RMM в стационарном режиме

Приведем некоторые свойства RMM в множестве стационарных стратегий F^∞ . Поскольку в данном разделе рассматривается конкретная стационарная стратегия $f^\infty \in F^\infty$, для краткости, соответствующие ей вектор доходов $r(f)$ и матрицу вероятностей переходов $P(f)$ будем обозначать через r и P соответственно, а их элементов r_i^k и p_{ij}^k писать без верхнего индекса k .

Пусть величина v_i^n представляет собой суммарный средний доход, полученный к моменту n при стационарной стратегии $f^\infty \in F^\infty$. Тогда в силу (1) имеет место рекуррентное соотношение

$$v_i^n = r_i + \sum_{j \in S} p_{ij} v_j^{n-1}, i \in S. \tag{5}$$

Лемма 2. Для RMM при любом $s \in S$ справедливо равенство

$$v_i^n - v_s^n = r_i - r_s + \sum_{j \in S} (p_{ij} - p_{sj}) (v_j^{n-1} - v_s^{n-1}) \tag{6}$$

для всех $i \in S_s$ и $n \geq 1$ при произвольном $v_i^0, j \in S_s$, где $S_s = S \setminus \{s\}$.

Положим

$$w_i^n = v_i^n - v_s^n, i \in S_s, w_s^n = r_s + \sum_{j \in S_s} p_{sj} w_j^{n-1}. \tag{7}$$

Теперь равенство (6) может быть записано в виде

$$w_i^n = r_i + \sum_{j \in S_s} p_{sj} w_j^{n-1} - w_s^n, i \in S_s. \tag{8}$$

Величины w_i^n , $i \in S_s$ называются относительными оценками.

Введем величину σ_{ij} ($i, j \in S$) такую, что $\sigma_{ij} = 1$, если $i \neq j$ и $\sigma_{ii} = 0$. Заметим, что $\sigma_{ij} = 1 - \delta_{ij}$, где δ_{ij} — символ Кронекера.

Лемма 3. Для RMM при любом $s \in S$ существуют конечные пределы $\lim_{n \rightarrow \infty} w_i^n = w_i$, $i \in S_s$. При этом имеет место равенство $w_s = g(f)$ и разложение

$$w_i + \sigma_{is} w_s = r_i + \sum_{j \in S_s} p_{sj} w_j, \quad i \in S. \quad (9)$$

Предложение 1. Для RMM величины w_i , $i \in S_s$ представляют собой относительные веса.

Предложение 2. Для RMM система уравнений (9) имеет единственное решение, такое, что $w_s = g(f)$, $w_i = v_i(f) - v_s(f)$, $i \in S_s$. (10)

Предложение 3. Для RMM, прежде чем решать соответствующую систему уравнений Ховарда (4), можно приравнять к нулю любое из весов v_i , $i \in S$.

Таким образом, в случае неотрицательной регулярной цепи, вопреки утверждению в [2], нет необходимости отыскивать (при большом N это достаточно сложно) некоторое существенное состояние s , чтобы положить $v_s = 0$. Здесь, так же как в положительно регулярной цепи, можно положить $v_N = 0$.

5. Построение операторов сжатия для RMM

Перейдем теперь к изучению RMM с помощью операторов сжатия.

Рассмотрим оператор $L(f)$, отображающий пространство \mathbb{V}^{N-1} в себя, определяемый равенством

$$L(f)(w)_s = [L_i(u_i)(w)_s - L_s(u_s)(w)_s] \quad (i \in S_s),$$

$$\text{где } (w)_s = [\omega_1, \dots, \omega_{s-1}, \omega_{s+1}, \dots, \omega_N]^T \in \mathbb{V}^{N-1},$$

$$L_i(u_i)(w)_s = r_i^k + \sum_{j \in S_s} p_{ij}^k w_j, \quad k = u_i \in U_i.$$

Теорема 2. Для RMM при любой $f \in F$ оператор $L(f)$ является на \mathbb{V}^{N-1} сжатием. При этом $L(f)$ имеет в \mathbb{V}^{N-1} единственную неподвижную точку $(w(f))_s$ и последовательные приближения

$$w_i^n = L_i(u_i)(w^{n-1})_s - \sigma_{is} w_s^n, \quad i \in S, \quad n \geq 1 \quad (11)$$

сходится к $(w(f))_s = [v_i(f) - v_s(f)] \quad (i \in S_s)$, начиная с любого $(w^0)_s \in \mathbb{V}^{N-1}$, причем $w_s^n \rightarrow g(f)$ при $n \rightarrow \infty$.

Данная теорема показывает, что задача нахождения предельного среднего дохода g и относительных весов w_i , $i \in S_s$ может быть сведена к эффективной рекуррентной процедуре последовательных приближений (7)–(8) с геометрической скоростью сходимости. Рекуррентные соотношения (7)–(8) по существу представляют собой метод простой итерации [10] и могут найти приложения даже в случае, когда число состояний N велико и применение метода Гаусса для решения системы уравнений Ховарда (4) невозможно.

Следует заметить ещё одно достоинство рекуррентной процедуры (7)–(8), состоящее в том, что при ее реализации можно прекратить вычисление на любом шаге итерации и использовать приближенные значения w^n для улучшения решения и принять w^n в качестве начального приближения для нового решения. Далее будет обсужден вопрос о возможности такого подхода в нахождении стационарной оптимальной стратегии RMM.

Рассмотрим теперь оператор Λ , отображающий пространство \mathbb{V}^{N-1} в себя, определяемый равенством

$$\Lambda(w)_s = [\Lambda_i(w)_s] \quad (i \in S_s), \quad (w)_s \in \mathbb{V}^{N-1}, \quad (12)$$

$$\text{где } \Lambda_i(w)_s = \max_{u_i} L_i(u_i)(w)_s - \max_{u_s} L_s(u_s)(w)_s.$$

Поскольку $\Lambda_i(w)_s = \min_{u_s} \max_{u_i} [L_i(u_i)(w)_s - L_s(u_s)(w)_s]$, оператор Λ может быть представлен в виде

$$\Lambda(w)_s = \min_{u_s} \max_{(f)_s} L[(f)_s, u_s](w)_s, \quad (w)_s \in \mathbb{V}^{N-1}, \quad \text{где } (f)_s = (u_1, \dots, u_{s-1}, u_{s+1}, \dots, u_N). \text{ Ясно, что } L[(f)_s, u_s] \text{ есть } L(f).$$

Теорема 3. Для RMM оператор Λ является на \mathbb{V}^{N-1} сжатием. При этом Λ имеет в \mathbb{V}^{N-1} единственную неподвижную точку $(w)_s$ и последовательные приближения

$$w_i^n = \max_{u_i} L_i(u_i)(w^{n-1})_s - \sigma_{is} w_s^n, \quad i \in S, \quad n \geq 1 \quad (13)$$

сходится к $(w)_s$, начиная с любого $(w^0)_s \in \mathbb{V}^{N-1}$.

6. Модифицированное уравнение Беллмана

Рассмотрим RMM с конечным горизонтом n . Критерий оптимальности в этом случае характеризуется величиной $V^n(\pi)$ — $(N \times 1)$ -мерным вектором суммарных средних доходов (1). Здесь стратегия π определяется как последовательность $(\dots, f_n, f_{n-1}, \dots, f_1)$ элементов множества F , где f_n — решающая функция, применяемая за n шагов

до окончания процесса принятия решений. Множество таких «восточных» стратегий обозначим $\bar{\Pi}$. При восточной стратегии $\pi \in \bar{\Pi}$ для вектора суммарных доходов имеет место рекуррентное соотношение

$$V^n(\pi) = r(f_n) + P(f_n)V^{n-1}(\pi), n \geq 1,$$

где $V^0(\pi) = 0$ (нулевой вектор столбец).

Определение 1. Стратегия $\pi^* \in \bar{\Pi}$ *равномерно оптимальна*, если для любой стратегии $\pi \in \bar{\Pi}$ и любого $n \geq 1$ выполняется неравенство $V^n(\pi^*) \geq V^n(\pi)$.

Заметим, что если стратегия $\pi^* \in \bar{\Pi}$ равномерно оптимальна, то она также оптимальна, но обратное утверждение неверно.

Равномерно оптимальная стратегия $\pi^* = (\dots, f_n^*, f_{n-1}^*, \dots, f_1^*, \dots)$ произвольной управляемой марковской цепи с конечным числом шагов определяется с помощью метода динамического программирования — функционального уравнения Беллмана [2]:

$$v_i^n(\pi^*) = \max_{k \in U_i} \left[r_i^k + \sum_{j \in S} p_{ij}^k v_j^{n-1}(\pi^*) \right], i \in S, n \geq 1, \tag{14}$$

при начальном условии $v_j^0, j \in S$.

Определение 2. Стратегия $\pi \in \bar{\Pi}$ *квазистационарна*, если, начиная с некоторого $n' < \infty$, имеет место равенство $f_n = f$ для всех $n \geq n'$.

Напишем рекуррентное соотношение (13) в развернутом виде

$$\begin{cases} w_s^n = \max_{k \in U_s} \left[r_s^k + \sum_{j \in S_s} p_{sj}^k w_j^{n-1} \right], \\ w_i^n = \max_{k \in U_i} \left[r_i^k + \sum_{j \in S_s} p_{ij}^k w_j^{n-1} \right] - w_s^n, i \in S_s, n \geq 1, \end{cases} \tag{15}$$

где $w_j^0, j \in S_s$.

Рекуррентные соотношения (15) назовем *модифицированным уравнением Беллмана*.

Поскольку для RMM в (15) $w^n \rightarrow w$ при $n \rightarrow \infty$, то справедливо

Следствие 1. Для RMM стратегия $\pi \in \bar{\Pi}$, порожденная модифицированным уравнением Беллмана (15) с соблюдением правила выбора решения, квазистационарна.

Теорема 4. Пусть для RMM в функциональном уравнении Беллмана (14) начатом $v_j^0, j \in S$ и в модифицированном уравнении Беллмана (15) начатом $w_j^0, j \in S_s$ соблюдено правило выбора решения. Тогда, решающие функции $\{f_n\}$ и $\{f_n^i\}$, порожденные рекуррентными соотношениями (14) и (15) соответственно, являются идентичными, т. е.

$$f_n \equiv f_n^i \text{ для всех } n = 1, 2, \dots \tag{16}$$

Следствие 2. Для RMM стратегия $\pi \in \bar{\Pi}$, порожденная модифицированным уравнением Беллмана (15), равномерно оптимальна.

Следствие 3. Для RMM стратегия $\pi \in \bar{\Pi}$ порожденная функциональным уравнением Беллмана (14) с соблюдением правила выбора решения, квазистационарна.

Например, в задаче водителя такси [1, 2] решающая функция $f_3 = [2, 2, 2]^T$, полученная методом динамического программирования, начинает повторяться уже с третьего шага итерации; $f_3 = f_4 = f_5 = \dots$

Теорема 5. Для RMM стратегия $\pi^* \in \bar{\Pi}$, порожденная модифицированным уравнением Беллмана (15) начатом $w_j^0, j \in S_s$ доставит критерию оптимальности $\Gamma(\pi)$ максимальное значение, причем все компоненты $g_i(\pi^*) = \max_{\pi} g_i(\pi), i \in S$ вектора $\Gamma(\pi^*)$ равны между собой.

Следствие 4. Для RMM существует стационарная оптимальная стратегия, максимизирующая средний доход за единицу времени.

Следствие 5. Для RMM последовательность решающих функций $\{f_n, n = 1, 2, \dots\}$, порожденная модифицированным уравнением Беллмана (15) с соблюдением правила выбора решения при любом начальном приближении $w_j^0, j \in S_s$ сходится к пределу $f^* \in F$ такому, что $f^{*\infty}$ — оптимальная стратегия, причем $\lim w_s^n = g(f^*)$ и $\lim w_s^n = v_i(f^*) - v_s(f^*), i \in S_s$ при $n \rightarrow \infty$.

Следствие 6. Для RMM система функциональных уравнений

$$w_i = \max_{u_i} L_i(u_i)(w)_s - \sigma_{is} w_s, \quad i \in S$$

имеет единственное решение $(w)_s = (w(f^*))_s$ такое, что $w_i = v_i(f^*) - v_s(f^*), j \in S_s$, причем $w_s = g(f^*)$, а $f^{*\infty}$ — стационарная оптимальная стратегия.

Таким образом, модифицированное уравнение Беллмана (15) позволяет решать задачу оптимизации RMM как на конечном, так и бесконечном горизонтах. При этом, в случае бесконечного управления, итерационный алгоритм (15) выгодно отличается от итерационного алгоритма Ховарда отсутствием необходимости решения систем линейных алгебраических уравнений в каждой итерации, а в случае конечного управления, выгодно отличается от функционального уравнения Беллмана (14) отсутствием проблемы переполнения памяти ЭВМ за счет значения суммарных средних доходов $v_i^n(\pi^*), i \in S$, которые при чрезмерно большом n могут превышать возможности запоминающего устройства ЭВМ.

7. IB_m -метод динамического программирования

Положив $L^1(f) \equiv L(f), \Lambda^1 \equiv \Lambda$ введем на \mathbb{V}^{N-1} операторы вида

$$L^m(f)(w)_s = L(f)L^{m-1}(f)(w)_s, \quad m = 2, 3, \dots, (w)_s \in \mathbb{V}^{N-1}; \tag{17}$$

$$\Lambda^m(w)_s = L^m(f^*)(w)_s, \quad m = 2, 3, \dots, (w)_s \in \mathbb{V}^{N-1}, \tag{18}$$

где элементы f^* определяются равенством $u_i^* = \arg \max_{u_i} L_i(u_i)(w)_s, i \in S$.

Теорема 6. Для RMM оператор Λ^m при любом $m \geq 1$ на \mathbb{V}^{N-1} является сжатием. При этом Λ^m при любом $m \geq 1$ имеет в \mathbb{V}^{N-1} единственную неподвижную точку $(w)_s = (w(f^*))_s$ такую, что $w_i = v_i(f^*) - v_s(f^*), i \in S_s$, причем $w_s = g(f^*)$, а $f^{*\infty}$ — оптимальная стратегия.

В соответствии с (17) и (18) и принципа сжимающих отображений для заданного $m \geq 1$ образуем, так называемое, m -уравнение преобразование относительных оценок

$$\begin{cases} (w^n)_s = L^m(f_n)(w^{n-1})_s, \quad n \geq 1, \\ u_i(n) = \arg \max_{u_i} L_i(u_i)(w^{n-1}(m))_s, \quad i \in S, \\ (w^0)_s = 0. \end{cases}$$

Эти соотношения могут быть записаны в развернутом виде

$$\begin{cases} w_i^n(l) = \max_{k \in U_i} \left[r_i^k + \sum_{j \in S_s} p_{ij}^k w_j^{n-1}(m) \right] - \sigma_{is} w_s^n(l), \quad i \in S, \quad n \geq 1, \\ u_i(n) = \arg \max_{k \in U_i} B_i^n(k, m), \quad i \in S, \\ w_i^n(l) = r_i^k + \sum_{j \in S_s} p_{ij}^k w_j^{n-1}(l-1) - \sigma_{is} w_s^n(l), \\ k = u_i(n), \quad i \in S, \quad l = 2, 3, \dots, m, \\ w_j^0(m) = 0, \quad i \in S, \end{cases} \tag{19}$$

где $B_i^n(k, m)$ означает выражения, стоящего в квадратных скобках.

Метод последовательных приближений, определенный рекуррентными соотношениями (19) назовем IB_m -методом динамического программирования. Заметим, что IB_1 -метод представляет собой модифицированное уравнение Беллмана (15), а IB_∞ -метод — итерационный алгоритм Ховарда, изложенного в разделе 3.

Введем отношение \succsim на множестве \mathbb{V}^N следующим образом: $a \succsim b$, если $a_i \geq b_i$ для всех $1 \leq i \leq N$ и $a \neq b (a, b \in \mathbb{V}^N)$.

Лемма 4. Для RMM если при некотором $f' = [u'_i] (i \in S) \in F$ выполнено неравенство

$$r(f') + P(f')v(f') \succsim r(f) + P(f)v(f), \tag{20}$$

то $g(f^*) > g(f)$, где $v(f)$ — вектор весов.

Следствие 7. Для RMM если при некотором $f' = [u'_i] (i \in S) \in F$ выполнены неравенства

$$L_i(u'_i)(w(f))_s \geq L_i(u_i)(w(f))_s, \quad i \in S \tag{21}$$

и хотя бы для одного $i \in S$ неравенства (21) строго больше, то $g(f^*) > g(f)$ где $(w(f))_s = (v(f) - v_s(f)1)_s$ — вектор относительных весов.

Теорема 7. Для RMM при любом конечном или бесконечном t последовательность решающих функций $\{f_n, n = 1, 2, \dots\}$, порожденная IB_m -методом (19) с соблюдением правила выбора решения при любых $w_j^0(m), j \in S_s$ сходится к пределу $f^* \in F$ такому, что f^* — оптимальная стратегия, причем $\lim_{n \rightarrow \infty} w_s^n(m) = g(f^*)$ и $\lim_{n \rightarrow \infty} w_i^n(m) = v_i(f^*) - v_s(f^*), i \in S_s$.

Следствие 8. Для RMM для любого конечного или бесконечного t существует конечное число $k_m \geq 1$ такое, что стратегия $\pi \in \bar{\Pi}$, порожденная IB_m -методом (19) с соблюдением правила выбора решения, квазистационарна такая, что $f_n = f^*$ для всех $n \geq k_m$, где f^* — оптимальная стратегия.

Теорема 8. Для RMM найдется конечное число $m_{IB} \geq 1$ такое, что стратегия f^* , полученная из соотношения IB_m -метода (19)

$$u_i^*(n) = \arg \max_{u_i} L_i(u_i)(w^{k_m}(m))_s, \quad i \in S,$$

будет оптимальна при любых $m \geq m_{IB}$.

Следствие 9. Для RMM скорость сходимости IB_m -метода (19) возрастает с возрастанием m и максимальна при $m \geq m_{IB}$.

Полученные результаты определяют оптимизационную схему последовательных приближений, которая порождает целый класс итерационных алгоритмов, зависящих от параметра m .

Итерационный алгоритм 1:

1. Задать $\epsilon > 0, s \in S$ и $m \geq 1$. Выбрать произвольное $(w^0(m))_s \in \mathbb{V}^{N-1}$.
2. С помощью (19), соблюдая правило выбора решения, вычислить $w^n(m)$ до тех пор, пока не будет выполнено условие $f_n = f_{n-1}$.
3. Если $\| (w^n(m))_s - (w^{n-1}(m))_s \| \leq \epsilon$, то f_n^{**} — оптимальная стратегия, а величина $w_s^n(m)$ — равна среднему доходу за единицу времени с точностью ϵ . В противном случае
4. Положив $(w^0)_s = (w^n(m))_s$ с помощью рекуррентного соотношения (11) вычислить вектор относительных весов $(w(f_n))_s$ с точностью ϵ . Затем, положив $(w^n(m))_s = (w(f_n))_s$ перейти к пункту 2.

При значении параметра $m = m_{IB}$ итерационный алгоритм 1 достигает свою наибольшую эффективность. В этом случае первая появившаяся субоптимальная решающая функция (решающая функция, оставшаяся неизменной на следующем шаге) будет оптимальной. Однако число m_{IB} заранее неизвестно. В идеальном случае $m_{IB} = 1$, при котором объем вычислений будет наименьшим. В связи с этим вычисления целесообразно начинать со значения $m = 1$. Если при этом, субоптимальная стратегия окажется неоптимальной, то на следующем шаге итерации m увеличивается на одну единицу. Эти соображения приводят к следующему варианту оптимизационной процедуры с переменным параметром m .

Итерационный алгоритм 2:

Этот алгоритм отличается от итерационного алгоритма 1 тем, что в пункте 1 полагается $m = 1$, а в пункте 4 — $m = m + 1$.

Заключение

Отправной точкой анализа RMM послужило утверждение теоремы 1. Опираясь на него, построен оператор сжатия (13), определяющий алгоритм итерации решающих функций — модифицированное уравнение Беллмана (15), которое при конечном горизонте порождает оптимальную марковскую стратегию, а при бесконечном горизонте сходится к решению RMM в стационарном режиме. Модифицированное уравнение Беллмана (15) позволило установить существование стационарной оптимальной стратегии (следствие 4) и выявить одно замечательное свойство функционального уравнения Беллмана (14) (следствие 3).

Для RMM построен IB_m -метод динамического программирования (19), который при $m = 1$ представляет собой модифицированное уравнение Беллмана, а при $m = \infty$ — итерационный алгоритм Ховарда для управляемой марковской цепи с одним эргодическим классом и, возможно, с невозвратными состояниями. Тем самым он является одновременно их обобщением и развитием. Следует отметить, что IB_m -метод динамического программирования при

любом $m (1 \leq m < \infty)$ выгодно отличается от итерационного алгоритма Ховарда отсутствием необходимости решения системы линейных алгебраических уравнений в каждой итерации. Такое положение позволяет решать задачи оптимизации управляемых марковских цепей достаточно больших размерностей при критерии средних доходов за единицу времени.

Вопрос о применимости метода Зейделя для ускорения сходимости модифицированного уравнения Беллмана остается открытым.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Леммы 2–3, предложение 2, теоремы 2–4, теорема 5 и ее следствия 4–6 представлены и доказаны в рамках регулярных марковских игр (см. [6]). Заметим, что когда один из двух игроков пассивен (не имеет возможности выбора стратегии), регулярная марковская игра представляет собой RMM.

Доказательство теоремы 6. Как показано в [6] для матрицы $Q_s(f)$ из теоремы 1 существует матричная норма $\|\cdot\|_*$ такая, что $\|Q_s(f)\|_* = \eta < 1$. Число η является коэффициентом сжатия оператора $L(f)$, что следует из соотношения $L(f)(w)_s = d(f) + Q_s(f)(w)_s$, где $d(f) = [r_i^k - r_i^l](i \in S_s) \in \mathbb{V}^{N-1}$, $k = u_i \in U_i$, $l = u_s \in U_s$. Сжимаемость оператора $L^m(f)$ вытекает из равенства $L^m(f)(w)_s = \sum_{n=0}^{m-1} Q_s^n(f)d(f) + Q_s^m(f)(w)_s$. Именно, для произвольных $(w')_s$ и $(w'')_s$ из \mathbb{V}^{N-1}

$$\|L^m(f)(w')_s - L^m(f)(w'')_s\| = \|Q_s^m(f)\|_* \|(w')_s - (w'')_s\| = \eta^m \|(w')_s - (w'')_s\|$$

и, следовательно, $L^m(f)$ есть оператор сжатия. Рассуждения, аналогичные использованными при доказательстве теоремы 3 (см. [6], теорема 3), приводят к тому, что $\|L^m(w')_s - L^m(w'')_s\| \leq \rho^m \|(w')_s - (w'')_s\|$, $\rho = \max_{f \in F} \|Q_s^m(f)\|_*$, т. е. оператор L^m есть сжатия.

Пусть $(w)_s$ — единственная неподвижная точка оператора L^m . Тогда справедливы равенства $(w)_s = L^m(w)_s = L^m(f^*)(w)_s = L(f^*)(w)_s$, где элементы f^* определяются равенством $u_i^* = \arg \max_{u_i} L_i(u_i)(w)_s$, $i \in S$. С другой стороны

$$\Lambda^m L(f^*)(w)_s = L(f^*)\Lambda^m(w)_s = L(f^*)(w)_s.$$

Это значит, что $L(f^*)(w)_s$ также является неподвижной точкой оператора L^m . Но L^m имеет на \mathbb{V}^{N-1} единственную неподвижную точку и, следовательно, $L(f^*)(w)_s = (w)_s$. Отсюда и из теоремы 2 и следствия 6 следует утверждение теоремы. Теорема 6 доказана.

Доказательство леммы 4. Пусть γ — $(N \times 1)$ -мерный вектор такой, что $\gamma = r(f') + P(f')v(f) - r(f) - P(f)v(f) \geq 0$. Для двух решающих функций f' и f из F согласно (4) имеем

$$g(f')\mathbf{1} + v(f') = r(f') + P(f')v(f'), \tag{П.1}$$

$$g(f)\mathbf{1} + v(f) = r(f) + P(f)v(f). \tag{П.2}$$

Вычитая (П.2) из (П.1) и полагая $\Delta g = g(f') - g(f)$, $\Delta v = v(f') - v(f)$, получим $\Delta g\mathbf{1} + \Delta v = \gamma + P(f')\Delta v$. Умножая обе части этого равенства слева на предельный вектор $\alpha(f')$, получим $\Delta g = \alpha(f')\Delta g\mathbf{1} = \alpha(f')\gamma \geq 0$, поскольку $\alpha_j(f') \geq 0$ при всех $j \in S$ в силу предположения неотрицательно регулярности цепи Маркова. Далее достаточно доказать, что $\Delta g \neq 0$. Предположим противное, т. е., что $\Delta g = 0$. Тогда $g(f') = g(f)$ и условие (21) эквивалентно неравенству $r(f') + P(f')v(f) \geq g(f)\mathbf{1} + v(f)$. Умножая обе части этого неравенства слева на предельную матрицу $P^*(f')$, получим $P(f')v(f) \geq P(f)v(f)$. Это противоречие доказывает лемму.

Доказательство теоремы 7. Согласно теореме 6 последовательность $\{(w^n(m))_s, n \geq 1\}$ при любом конечном m сходится к $(w)_s$ — единственной неподвижной точке оператора L^m . Значит, если будет соблюдено правило выбора решения, стратегия $\pi = (\dots, f_n, f_{n-1}^m, \dots, f_1^m)$, где $f^m = (f, f, \dots, f)$ — последовательность, состоящая из m однотипных элементов вида f , порожденная IB_m -методом является квазистационарной, т. е. найдется конечное число k_m такое, что $f_n = f^*$ для всех $n \geq k_m$, где $f^{*\infty}$ — оптимальная стратегия.

В случае $m = \infty$ на каждом шаге итерации n имеем решающую функцию f_n , которая является либо искомой (случай, когда $w_i^n(\infty) = \max_{u_i} L_i(u_i)(w^n(\infty))_s - \sigma_{is} w_s^n(\infty)$ для всех $i \in S$), либо имеет стационарное улучшение f_{n+1} (случай, когда $\max_{u_i} L_i(u_i)(w^n(\infty))_s > L_i[u_i(n)](w^n(\infty))_s$ хотя бы для одного $i \in S$); тогда согласно следствию 7 $g(f_{n+1}) > g(f_n)$. Поскольку существует лишь конечное число стационарных стратегий, то за конечное число

итераций k_∞ найдется решающая функция $f_n = f^*$, которая не имеет стационарных улучшений. Следовательно, она должно быть искомой, образующая оптимальную стационарную стратегию $f^{*\infty}$. Теорема доказана.

Доказательство теоремы 8. Поскольку для $\rho = \max_{f \in F} \|Q_s^m(f)\|_*$

$$\|(\omega(f^*))_s - (\omega^n(m))_s\| = \|\Lambda^m(\omega(f^*))_s - \Lambda^m(\omega^{n-1}(m))_s\| \leq \leq \rho^m \|(\omega(f^*))_s - (\omega^{n-1}(m))_s\|, \text{ где } (\omega(f^*))_s = (v(f^*) - v_s(f^*)\mathbf{1})_s,$$

скорость сходимости IB_m -метода возрастает с возрастанием m . Следовательно, для целых чисел $k_m, m \geq 1$ определенных выше, имеет место неравенство $k_m \geq k_{m+1}$. С другой стороны, монотонно убывающая последовательность $\{k_m, m \geq 1\}$ ограничена снизу числом k_∞ . Это значит, что найдется число $m_{IB} < \infty$ такое, что $k_m = k^*$ для всех $m \geq m_{IB}$. Ниже устанавливается, что $k^* = k_\infty$.

Пусть $f_1(\infty), f_2(\infty), \dots, f_{k_\infty}(\infty)$ — решающие функции, найденные IB_∞ -методом (итерационным алгоритмом Ховарда начатым со второго шага, изложенным в разделе 3). Покажем, что эти же решающие функции могут быть определены IB_m -методом, если положить $m \geq m_{IB}$.

Из (19) следует, что при любом $m \geq 1$ IB_m -метод вначале итерационного процесса определяет решающую функцию $f_1(m) = f_1(\infty)$. Далее с помощью третьего рекуррентного соотношения (19) вычисляются величины $w_i^1(m), i \in S$, которые согласно теореме 2 при $m \rightarrow \infty$ стремятся к величинам $w_i^1(\infty), i \in S$ таким, что $w_i^1(\infty) = w_i(f_1(\infty)) = v_i(f_1(\infty)) - v_s(f_1(\infty)), i \in S_s, w_s^1(\infty) = g(f_1(\infty))$. Отсюда видно, что величины $w_i^1(m), i \in S$ представляют собой решение системы уравнений Ховарда (4) для $f_1(\infty) \in F$. Следующей решающей функцией, определяемая IB_m -методом будет $f_2(m) \in F$. Из сходимости $w_i^1(m) \rightarrow w_i^1(\infty), i \in S$ следует сходимость $f_2(m) \rightarrow f_2(\infty)$, при $m \rightarrow \infty$. Это значит, что найдется такое конечное число m_2 , что $f_2(m_2) = f_2(\infty)$. Следовательно, если в IB_m -методе положить $m = m_2$, то после двух итераций получаются решающие функции $f_1(\infty)$ и $f_2(\infty)$.

Аналогичным образом можно установить существования конечных чисел $m_3, m_4, \dots, m_{k_\infty}$ таких, что $f_k(m_k) = f_k(\infty), k = 3, 4, \dots, k_\infty$. Теперь, если положить $m = \max\{m_3, m_4, \dots, m_{k_\infty}\} (m_1 = 1)$, то IB_m -метод за k_∞ итераций порождает решающих функций $f_1(\infty), f_2(\infty), \dots, f_{k_\infty}(\infty)$. Отсюда можем заключить, что $k^* = k_\infty$. Теорема 8 доказана.†

Литература:

1. Ховард, Р. Динамическое программирование и марковские процессы. М.: Сов. Радио, 1964. 192 с.
2. Майн, Х., Осаки С. Марковские процессы принятия решений. М.: Наука, 1977. 176 с.
3. Ибрагимов, А. А. Об управляемых марковских процессах с поглощением // РАН. Автоматика и телемеханика. 1999. №12. с. 80–89.
4. Ибрагимов, А. А. О существовании и единственности ситуации равновесия в марковских играх с переоценкой // НАН Украины. Кибернетика и системный анализ. 2000. №6. с. 152–165.
5. Ибрагимов, А. А. Существование и нахождение значения и оптимальных стратегий в рекурсивных играх // Известия РАН. Теория и системы управления. 2001. №4. с. 102–109.
6. Ибрагимов, А. А. Существование и нахождение значения и оптимальных стратегий в регулярных марковских играх // Известия РАН. Теория системы управления. 2002. №3. с. 29–40.
7. Бертсекас, Д., Шрив С. Стохастическое оптимальное управление: случай дискретного времени. М.: Наука, 1985. 208 с.
8. Саримсаков, Т. А. Основы теории процессов Маркова. Ташкент: Фан, 1988. 248 с.
9. Ибрагимов, А. А. Об одном свойстве регулярной цепи Маркова // Украинский математический журнал. 2002. Т 54. №4. с. 466–471.
10. Крылов, В. И., Бобков В. В., Монастырский П. И. Вычислительные методы. Т. 1. М.: Наука, 1976. 304 с.

Влияние поверхностного напряжения на морфологическую устойчивость многослойного пленочного покрытия при поверхностной диффузии

Костырко Сергей Алексеевич, кандидат физико-математических наук, доцент;

Шувалов Глеб Михайлович, студент

Санкт-Петербургский государственный университет

В последние годы не ослабевает интерес к исследованиям и разработке технологий основанных на использовании неоднородных тонкопленочных структур.

Пленочные покрытия способны повысить стойкость к окислению и диффузии, температуру плавления и микротвердость основного материала. Интерес к таким покрытиям также возрастает за счет развития исследований в области композиционных материалов. Многослойные пленочные структуры, состоящие из различных чередующихся слоев, зачастую обладают принципиально новыми механическими, оптическими, электрическими и магнитными свойствами, не характерными для однородных пленок. Пленочные покрытия получили широкое применение при решении многочисленных инженерных задач в электронной и оптоэлектронной промышленности. Технология производства таких устройств требует, чтобы наличие дефектов в них было сведено к минимуму.

Стоит отметить, что в такого рода инженерных конструкциях высокую важность представляют вопросы прочности соединения материалов с различными упругими свойствами. Основной причиной формирования дефектов в пленочных покрытиях является наличие рельефа поверхности пленки. Изменение формы поверхности может происходить на этапе выращивания и термической обработки пленочного покрытия, сопровождаемые процессами конденсации и испарения, и при других фазовых превращениях [10].

Исследование, проведенное в [3], показало, что образование рельефа поверхности пленки приводит к появлению дополнительных напряжений, которые отсутствуют в случае плоской поверхности. Анализ влияния искривленной поверхности пленки на напряженное состояние многослойной пленочной системы без учета поверхностного напряжения был представлен в работе [2].

Данная работа является продолжением исследований [3–9] по изучению механизма формирования регулярных структур на поверхности пленочного покрытия. Предполагается, что под действием интенсивного нагрева поверхность пленочного покрытия становится волнистой. Здесь рассматривается проблема потери устойчивости плоской формы поверхности пленочного покрытия при поверхностной диффузии. При этом в отличие от работы [2] учитывается поверхностное напряжение, которое позволяет учесть знак продольных усилий [1]. Задача формулируется в двумерной постановке.

Постановка задачи. В качестве модели многослойного пленочного покрытия толщины $h_f = \sum_{i=1}^N h_i$, осажженного на подложку толщины $h_s \gg h_f$ и находящегося в условиях плоской деформации, рассмотрим неоднородную упругую полуплоскость $\Omega = \bigcup_{i=1}^{N+1} \Omega_i$ с прямолинейными межфазными границами Γ_j .

Пусть на границах отсутствуют скачки вектора напряжений и вектора перемещений. При решении задачи будем учитывать поверхностное напряжение [1, 7, 8]. Считаем, что равновесное состояние поверхности описывается обобщенным законом Лапласа-Юнга. В двумерном случае при отсутствии внешней нагрузки это условие было получено в работе [7].

В силу малости искривления будем считать, что с изменением рельефа поверхностное напряжение σ_s , также как и поверхностная энергия γ остаются постоянными.

В подложке Ω_{N+1} действует постоянное продольное напряжение σ_{N+1} , при этом все остальные напряжения, а также угол поворота ω на бесконечности равны нулю. Морфологию поверхности пленки будем описывать посредством произвольной периодической функции

$$h(x_1, t) = H_1 + g(x_1, t), \quad (1)$$

где $g(x_1, t) = g(-x_1, t) = g(x_1 + \lambda, t)$.

На коэффициенты разложения функции $g(x_1, t)$ в ряд Фурье накладываем следующие ограничения:

$$g(x_1, t) = \sum_{k=1}^{+\infty} A_n(t) \cos kx_1, \quad \max_n |A_n(t)| / \lambda = \varepsilon \ll 1 \forall t,$$

здесь $k = 2\pi n / \lambda$ — волновое число.

Значения параметров задачи, при которых $\lim_{t \rightarrow \infty} A_n(t) = 0$, будут соответствовать устойчивому состоянию плоской формы поверхности пленки. Требуется оценить влияние поверхностного напряжения на устойчивое состояние плоской формы пленочного покрытия.

Эволюционное уравнение. Будем считать, что эволюция напряженной поверхности пленки происходит под действием поверхностной диффузии, определяемой производной химического потенциала вдоль поверхности. Считая, что диффузионный процесс локализован лишь в приповерхностном слое, запишем выражение для скорости движения точек поверхности [8]

$$\frac{\partial h(x_1, t)}{\partial t} = \frac{D_s C_s \Omega^2}{k_b T} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \left[U(x_1, t) - \gamma \frac{\partial^2 h(x_1, t)}{\partial x_1^2} \right], \tag{2}$$

где Ω — атомный объем, D_s — коэффициент поверхностной самодиффузии, C_s — концентрация поверхностных дефектов, k_b — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура.

Как и в [7, 8], процесс поверхностной потери устойчивости напряженного твердого тела рассматривается в квазистатической постановке. В силу чего для определения напряженно-деформированного состояния композита строится решение статической задачи теории упругости при фиксированном значении времени.

На основании комплексных потенциалов Гурса-Колосова, соотношений Мухелишвили, принципа суперпозиции [4, 5] и метода возмущений решение сводится к системе интегральных уравнений Фредгольма второго рода. Поскольку форма свободной границы определяется выражением (1), решение задачи в каждом приближении находится в виде рядов Фурье.

Интегрирование уравнения (2) при условии $A_n(0) = a_n$ приводит к следующей зависимости амплитуды каждой гармоники возмущения от времени, физических и геометрических параметров задачи [9]

$$\ln \left(\frac{A_n(t)}{a_n} \right) = P_n(\lambda; h_1 \dots h_N; \mu_1 \dots \mu_{N+1}; \nu_1 \dots \nu_{N+1}; K_s; \sigma_s, \sigma_{11}^\infty) t.$$

Численные результаты. Оценим влияние длины волны на морфологическую устойчивость поверхности двухслойного $N=2$ пленочного покрытия. При нахождении напряженно-деформированного состояния композита используем первое $n=1$ приближение в методе разложения по малому параметру. Критическому состоянию, при котором наблюдается потеря устойчивости плоской формы поверхности пленки, соответствует такое $\lambda = \lambda_{cr}$, при котором $\ln \left(\frac{A_n(t)}{a_n} \right) = 0$. При $\lambda < \lambda_{cr}$ происходит сглаживание рельефа.

В качестве параметров задачи используем следующие константы: $h_1=0,08$ мкм и $0,16$ мкм, $h_2=0,08$ мкм и $0,16$ мкм, $\nu_1=\nu_2=\nu_3=0,3$, $\sigma_0=\pm 1$ ГПа, $\sigma_s = \gamma = 1$ Н/м, $\mu_1=100$ ГПа, $\mu_1 / \mu_2 = 0,1; 10$ и $\mu_2 / \mu_3 = 0,1; 10$.

Учет поверхностного напряжения позволяет оценить влияние знака продольных усилий [1]. В таблице 1 приведены относительные разности критических значений длин волн $|\lambda_{cr}^+ - \lambda_{cr}^-| / \lambda_{cr}^+$, при разных знаках продольных усилий для пленок различной толщины.

Таблица 1. Влияние знака продольных усилий

μ_1/μ_2		10	10	1/10	1/10
μ_2/μ_3		10	1/10	10	1/10
h_1	h_2	$ \lambda_{cr}^+ - \lambda_{cr}^- / \lambda_{cr}^+$			
0.08	0.08	0.00463	0.007062	-	-
0.08	0.16	0.004594	0.0059	-	-
0.16	0.08	0.006983	0.009162	0.05709	-

Как видно из Таблицы 1, влияние знака продольных усилий оказалось незначительным, за исключением случая, когда пленочная система описывается следующими параметрами: $h_1=0,16$ мкм, $h_2=0,08$ мкм, $\mu_1 / \mu_2 = 0,1$, $\mu_2 / \mu_3 = 10$ — здесь относительная разность критических значений длин волн при различных знаках продольных усилий составила порядка 6%.

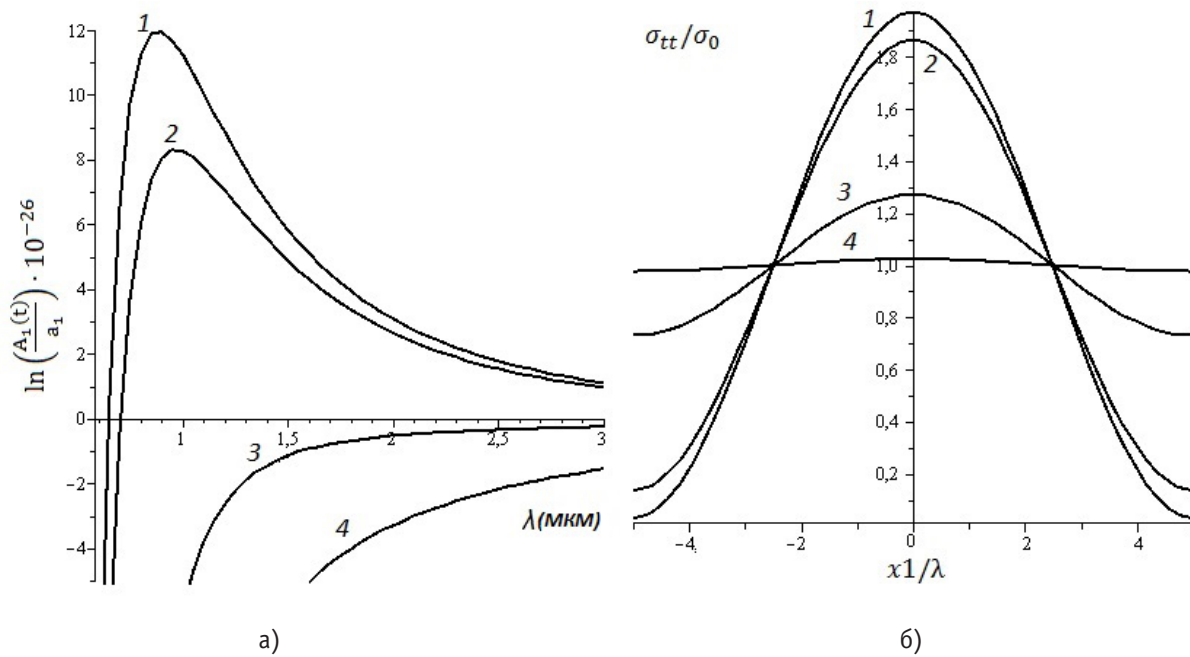


Рис. 1. Относительная амплитуда (а) и напряжения (б)

На Рис. 1. представлены графики относительной амплитуды и напряжений для двухслойного пленочного покрытия, при $h_1=0,08$ мкм, $h_2=0,08$ мкм, $\nu_1=\nu_2=\nu_3=0,3$,

$\sigma_0=\pm 1$ ГПа, $\gamma=1$ Н/м, $\mu_1=100$ ГПа без учета поверхностного напряжения $\sigma_s=0$ Н/м. Кривые 1–4 соответствуют следующим отношениям жесткостей материалов: $\mu_1/\mu_2=10$, $\mu_2/\mu_3=10$; $\mu_1/\mu_2=10$, $\mu_2/\mu_3=0,1$; $\mu_1/\mu_2=0,1$, $\mu_2/\mu_3=10$ и $\mu_1/\mu_2=0,1$, $\mu_2/\mu_3=0,1$.

Литература:

1. Grilhe, J. Study of roughness formation induced by homogeneous stress at the free surfaces of solids // Acta Metallurgica and Materialia, 1993. Vol. 41, N 3. P. 909–913.
2. Kim J.-H., Vlassak J. J. Perturbation analysis of an undulating free surface in a multi-layered structure // Int. J. Solids and Structures. 44 (2007) 7924–7937.
3. Викулина, Ю. И., Греков М. А., Костырко С. А. Модель пленочного покрытия со слабо искривленной поверхностью // Изв. РАН. Механика твердого тела. 2010. №6. с. 16–28.
4. Греков, М. А., Костырко С. А. Многослойное пленочное покрытие под действием периодической системы поверхностных сосредоточенных сил // Труды ЦНИИ им. акад. А. Н. Крылова. 2010. Т. 53. С. 29–36.
5. Греков, М. А., Костырко С. А. Напряженное состояние тонкого покрытия при действии периодической системы поверхностных сосредоточенных сил // Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 10: Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. 2004. №3–4. с. 99–107.
6. Греков, М. А., Костырко С. А. Пленочное покрытие на шероховатой поверхности упругого тела // Прикладная математика и механика. 2013. Т. 77. Вып. 1. с. 113–128.
7. Греков, М. А., Костырко С. А. Потеря устойчивости плоской формы пленочного покрытия при поверхностной диффузии // Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 10: Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. 2007. №1. с. 46–54.
8. Костырко, С. А. Влияние формы возмущения на устойчивость плоской поверхности пленочного покрытия при диффузионных процессах // Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 10: Математика. Механика. Астрономия. 2011. №3. с. 101–111.
9. Костырко, С. А., Шувалов Г. М. Образование дефектов поверхности многослойного пленочного покрытия при диффузионных процессах // Процессы управления и устойчивость. 2014. Т. 1. №1. с. 169–174.
10. Пронина, Ю. Г. Оценка устойчивости упругой трубы под давлением коррозионных сред // Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 10: Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. 2006. №3. с. 55–63.

О спектре тензорной суммы моделей Фридрикса

Расулов Тулкин Хусенович, кандидат физико-математических наук, доцент;

Бахронов Бекзод Исломович, студент

Бухарский государственный университет (Узбекистан)

Модельный оператор, ассоциированный с системой трех частиц на d -мерной решетке рассматривается как тензорная сумма моделей Фридрикса. Найден явный вид существенного и дискретного спектра.

Ключевые слова: модельный оператор, тензорная сумма, модель Фридрикса, определитель Фредгольма, существенный и дискретные спектры.

Пусть X_1 и X_2 бесконечномерные гильбертовы пространства и $X := X_1 \otimes X_2$ — их тензорное произведение. Рассмотрим линейные ограниченные самосопряженные операторы A и B , действующие в X_1 и X_2 , соответственно. Обозначим через $A \otimes B$ тензорное произведение операторов A и B . Оператор $A \otimes B$ также является линейным ограниченным самосопряженным оператором, действующим в гильбертовом пространстве X . Положим $T := A \otimes I_1 + I_2 \otimes B$, где I_1 и I_2 — тождественные операторы в X_1 и X_2 , соответственно. Оператор T мы будем называть тензорной суммой A и B , и будем обозначать через $A \oplus B$. Оператор $A \oplus B$ также является линейным ограниченным самосопряженным оператором, действующим в гильбертовом пространстве X . Для спектра оператора $A \oplus B$ имеет место равенства [1]

$$\sigma(T) = \sigma(A) + \sigma(B) = \{ \xi \in \mathbb{R} : \xi = \mu + \lambda, \mu \in \sigma(A), \lambda \in \sigma(B) \}.$$

Очевидно, что если $\mu \in \sigma_{\text{disc}}(A)$ и $\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(B)$, то $\mu + \lambda \in \sigma_{\text{disc}}(A \oplus B)$.

В моделях физики твердого тела [2,3], а также решетчатой теории поля [4,5] возникают так называемые дискретные операторы Шредингера, являющиеся решетчатым аналогом обычного оператора Шредингера в непрерывном пространстве. Все гамильтонианы этих моделей коммутируют с группой трансляций на решетке. Однако, большое количество интересных задач в физике твердого тела связаны с неидеальными кристаллами, трансляционная инвариантность которых нарушена примесями или дефектами, т. е. один или конечное число узлов решетки оказываются выделенными.

Исследование спектров операторов Шредингера является наиболее интенсивно изучаемым объектом в теории операторов. Одним из важных вопросов в спектральном анализе таких операторов является изучение конечности числа собственных значений, лежащих вне существенного спектра.

В работе [6] изучены спектральные свойства решетчатого гамильтониана \hat{H} физической системы, состоящей из двух свободных электронов и одной примеси на решетке. Гамильтониан \hat{H} в импульсном представлении действует в тензорном произведении $X = X_1 \otimes X_1$ гильбертово пространства $X_1 = L_2(T^d)$, где T^d — d -мерный тор, и он представляется в виде $H = H_0 - V$, где H_0 — оператор умножения на функцию $u(x, y)$ (как невозмущенный оператор), а оператор V (т. е. некомпактное возмущение) действует по формуле

$$(Vf)(x, y) = \int_{T^d} \int_{T^d} k(x, s) \delta(y - t) f(s, t) ds dt + \int_{T^d} \int_{T^d} k(y, t) \delta(x - s) f(s, t) ds dt.$$

Здесь $k(\cdot, \cdot)$ — аналитическая функция на $(T^d)^2$ и $k(x, y) = \overline{k(y, x)}$, а $\delta(x)$ — дельта функция Дирака.

В настоящей работе рассмотрим специальный случай:

$$u(x, y) = w(x) + w(y), \quad k(x, y) = \sum_{i=1}^n v_i(x) v_i(y).$$

Данная работа посвящена изучению существенного и дискретного спектров операторов H в рассматриваемом специальном случае. С помощью тензорной структуры изучен спектр оператора H .

Пусть $L_2^s((T^d)^2)$ — гильбертово пространство квадратично-интегрируемых симметричных (комплекснозначных) функций, определенных на $(T^d)^2$. В гильбертовом пространстве $L_2^s((T^d)^2)$ рассмотрим гамильтониан H , действующий по формуле

$$(Hf)(x, y) = (w(x) + w(y))f(x, y) - \sum_{i=1}^n v_i(x) \int_{T^d} v_i(t) f(y, t) dt - \sum_{i=1}^n v_i(y) \int_{T^d} v_i(t) f(x, t) dt.$$

При этом $f \in L_2^s((T^d)^2)$; $w(\cdot)$ и $v_i(\cdot), i = \overline{1, n}$ — вещественнозначные непрерывные функции на T^d . В этих

предположениях оператор H является ограниченным и самосопряженным в $L_2^s((T^d)^2)$.

Наряду с оператором H , рассмотрим еще оператор h , действующий в гильбертовом пространстве $L_2(T^d)$ по формуле $h := h_0 - \nu$, где

$$(h_0 f)(x) = w(x)f(x), \quad (\nu f)(x) = \sum_{i=1}^n v_i(x) \int_{T^d} v_i(t) f(t) dt, \quad f \in L_2(T^d).$$

Из определения операторов H и h получим, что оператор H можно представить как тензорная сумма $H = h \otimes I + I \otimes h$. Здесь I означает тождественный оператор в $L_2(T^d)$.

В данной работе будем изучать спектральные свойства оператора H с помощью тензорной суммы операторов.

Оператор возмущения ν оператора h_0 является самосопряженным оператором ранга не более, чем n . Из известной теоремы Г. Вейля о сохранении существенного спектра при возмущениях конечного ранга вытекает, что существенный спектр $\sigma_{\text{ess}}(h)$ оператора h совпадает с существенным спектром оператора h_0 . Известно, что $\sigma_{\text{ess}}(h_0) = [m, M]$, где числа m и M определяются равенствами

$$m := \min_{x \in T^d} w(x), \quad M := \max_{x \in T^d} w(x).$$

Из последних двух фактов следует, что $\sigma_{\text{ess}}(h) = [m, M]$.

Определим регулярные в области $C \setminus [m, M]$ функции

$$I_{ij}(z) := \int_{T^d} \frac{v_i(t)v_j(t)dt}{w(t) - z}, \quad i, j = 1, \dots, n, \quad \Delta(z) := \det(\delta_{ij} - I_{ij}(z))_{i,j}^n = 1,$$

где

$$\delta_{ij} := \begin{cases} 1, & \text{если } i = j \\ 0, & \text{если } i \neq j \end{cases}.$$

Видно, что $I_{ij}(z) = I_{ji}(z)$ при всех $i, j = 1, \dots, n$.

Установим связь между собственными значениями оператора h и нулями функции $\Delta(\cdot)$.

Лемма 1. Число $z \in C \setminus [m, M]$ является собственным значением оператора h , тогда и только тогда, когда $\Delta(z) = 0$.

Доказательство. Пусть число $z \in C \setminus [m, M]$ есть собственное значение оператора h , $f \in L_2(T^d)$ — соответствующая собственная функция. Тогда функция f удовлетворяет уравнению

$$w(x)f(x) - \sum_{i=1}^n v_i(x) \int_{T^d} v_i(t) f(t) dt = zf(x). \tag{1}$$

Заметим, что для любых $z \in C \setminus [m, M]$ имеет место соотношение $w(x) - z \neq 0$. Тогда из уравнения (1) для f имеем

$$f(x) = \frac{1}{w(x) - z} \sum_{i=1}^n C_i v_i(x), \tag{2}$$

где

$$C_i = \int_{T^d} v_i(t) f(t) dt, \quad i = 1, \dots, n. \tag{3}$$

Подставляя выражение (2) для f в равенства (3), получим, что уравнение (1) имеет ненулевое решение тогда и только тогда, когда система n линейных уравнений с n неизвестными

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^n (\delta_{1j} - I_{1j}(z)) C_j = 0 \\ \sum_{j=1}^n (\delta_{2j} - I_{2j}(z)) C_j = 0 \\ \dots \dots \dots \\ \sum_{j=1}^n (\delta_{nj} - I_{nj}(z)) C_j = 0 \end{cases}$$

имеют ненулевое решение $(C_1, \dots, C_n) \in C^n$, т. е. когда $\Delta(z) = 0$, где C^n — декартова n -ная степень множества C . Лемма 1 доказана.

Из леммы 1 вытекает, что имеет место равенство

$$\sigma_{\text{disc}}(h) = \{z \in C \setminus [m, M] : \Delta(z) = 0\}.$$

Следовательно, функция $\Delta(\cdot)$ является определителем Фредгольма, ассоциированным с оператором h .

Для любого $\lambda \in R$ и ограниченного самосопряженного оператора A , действующего в гильбертовом пространстве X , обозначим через $X_A(\lambda)$, такое подпространство, что $(Af, f) < \lambda \|f\|^2$ для любого $f \in X_A(\lambda)$, и положим $N(\lambda, A) := \sup_{X_A(\lambda)} \dim(X_A(\lambda))$. Число $N(\lambda, A)$ равно бесконечности, если $\lambda > \min \sigma_{\text{ess}}(A)$ и если число $N(\lambda, A)$

конечно, то оно равно числу собственных значений оператора A (с учетом кратности), меньших чем λ .

Следующая лемма описывает число и местонахождение собственных значений оператора h .

Лемма 2. Оператор h может иметь не более чем n собственных значений (с учетом кратности), лежащих левее m и не имеет собственных значений, лежащих правее M .

Доказательство. Так как ν является n -мерным оператором, в силу теоремы 9.3.3 из книги [7] имеем

$$N(m, h_0) - n \leq N(m, h) \leq N(m, h_0) + n,$$

$$N(-M, -h_0) - n \leq N(-M, -h) \leq N(-M, -h_0) + n.$$

Учитывая равенство $\sigma(h_0) = [m, M]$, получим, что $N(m, h_0) = N(-M, -h_0) = 0$. Следовательно, $N(m, h) \leq n$.

Из $\nu \geq 0$ следует, что при всех $z > M$ и $f \in L_2(T^d)$ имеет место соотношение

$$((h - z)f, f) = \int_{T^d} (\varepsilon(p, t) - z) |f(t)|^2 dt - (\nu f, f) < 0.$$

Это означает, что оператор h не имеет собственных значений, лежащих правее M , т. е. $N(-M, -h) = 0$. Лемма 2 доказана.

Теперь сформулируем основной результат работы.

Теорема 1. а) Если $\sigma_{\text{ess}}(h) = \emptyset$, то $\sigma(H) = \sigma_{\text{ess}}(H) = [2m, 2M]$.

б) Пусть $\sigma_{\text{disc}}(h) \neq \emptyset$. Предположим, что $\sigma_{\text{disc}}(h) = \{E_1, E_2, \dots, E_k\}$, $1 \leq k \leq n$. Тогда имеет место равенства

$$\sigma_{\text{ess}}(H) = [2m, 2M] \cup \bigcup_{i=1}^k [m + E_i, M + E_i], \quad \sigma_{\text{disc}}(H) = \bigcup_{i,j=1}^k \{E_i + E_j\}.$$

Доказательство. Как отметили выше из определения операторов H и h получим, что оператор H можно представить как тензорная сумма $H = h \otimes I + I \otimes h$. Поэтому для спектра оператора H имеем

$$\sigma(H) = \sigma(h) + \sigma(h) = \{\xi \in R : \xi = \mu + \lambda, \mu, \lambda \in \sigma(h)\}. \tag{4}$$

Если $\sigma_{\text{disc}}(h) \neq \emptyset$, и следовательно, $\sigma(h) = \sigma_{\text{ess}}(h) = [m, M]$, то $\sigma(H) = \sigma_{\text{ess}}(H) = [2m, 2M]$.

Пусть теперь $\sigma_{\text{disc}}(h) \neq \emptyset$. По предположению $\sigma_{\text{disc}}(h) = \{E_1, E_2, \dots, E_k\}$, $1 \leq k \leq n$. Теперь соотношение (4) завершает доказательство теоремы 1.

Из утверждения б) теоремы 1 следует, что множество $\sigma_{\text{ess}}(H)$ представляет собой объединение не более чем $n + 1$ отрезков, а число собственных значений (с учетом кратности) не превосходит чем $n(n + 1)/2 = 1 + 2 + \dots + n$, т. е. $N(H, 2m) \leq n(n + 1)/2$.

Литература:

1. М. Рид, Б. Саймон, Методы современной математической физики, т. 4. Анализ операторов, М.: Мир. 1982.
2. D. C. Mattis. The few-body problem on lattice // Rev. Modern Phys., — 1986, — V. 58, P. 361–379.
3. A. I. Mogilner. Hamiltonians in solid state physics as multiparticle discrete Schroedinger operators: problems and results // Advances in Sov. Math., — 1991, — V. 5, P. 139–194.
4. В. А. Малышев, Р. А. Минлос. Кластерные операторы // Труды семинара им. И. Г. Петровского. — 1983, — Вып. 9, с. 63–80.

5. С. Н. Лакаев, Р. А. Минлос. О связанных состояниях кластерного оператора. Теоретическая и математическая физика, — 1979, — Т. 39, с. 83–92.
6. Ю. Х. Эшкабилов. Об одном некомпактном возмущении в непрерывном спектре оператора умножения на функцию // Узб. матем. журнал, — 2003, — № 1, с. 81–88.
7. М. Ш. Бирман, М. З. Саломьяк, Спектральная теория самосопряженных операторов в гильбертовом пространстве. Издательство ЛГУ, Ленинград, 1980.

Связь между числовым образом и спектром модели Фридрихса с двумерным возмущением

Расулов Тулкин Хусенович, кандидат физико-математических наук, доцент;
Дилмуродов Элёр Бахтиёрович, ассистент
Бухарский государственный университет (Узбекистан)

В работе рассматривается ограниченная и самосопряженная модель Фридрихса с двумерным возмущением, который ассоциирован с системой двух квантовых частиц на трехмерной решетке. Найдены необходимые и достаточные условия для того, чтобы спектр этой модели совпадал с его числовым образом.

Ключевые слова: модель Фридрихса, числовой образ, существенный и дискретные спектры, резонанс, пороговое собственное значение.

Одним из классических методов изучения спектра линейного оператора A в комплексном гильбертовом пространстве H с областью определения $D(A) \subset H$ является изучение его числовой области значений:

$$W(A) := \{(Ax, x) : x \in D(A), \|x\| = 1\}.$$

Это понятие впервые введено в работе [1] и доказано, что числовой образ матрицы содержит все ее собственные значения. Вслед за этим это понятие обобщено разными способами, см. например [2–6]. Из определения множество $W(A)$ видно, что оно является подмножеством комплексной плоскости и геометрические свойства множества $W(A)$ дает некоторые информации об операторе A .

Отметим, что [7] в случае, когда оператор является ограниченным и самосопряженным, замыкание числового образа есть выпуклая оболочка спектра. Возникает естественный вопрос: для каких классов ограниченных самосопряженных операторов в бесконечномерном пространстве спектр совпадает с числовым образом? Вообще, существует ли такой оператор кроме скалярного оператора? В данной статье установлена непустота такого класса.

Пусть $T^3 \equiv (-\pi; \pi]^3$ — трехмерный куб с соответствующим отождествлением противоположных граней. Рассмотрим модель Фридрихса H , действующий в гильбертовом пространстве $L_2(T^3)$ квадратично-интегрируемых (комплекснозначных) функций, определенных на T^3 по формуле

$$H := H_0 + V_1 + V_2$$

где операторы $H_0, V_\alpha, \alpha = 1, 2$ определяются по правилам:

$$(H_0 f)(p) = \varepsilon(p) f(p), \quad f \in L_2(T^3),$$

$$(V_\alpha f)(p) = (-1)^\alpha \mu_\alpha v_\alpha(p) \int_{T^3} v_\alpha(t) f(t) dt, \quad f \in L_2(T^3).$$

Здесь $\mu_\alpha > 0, \alpha = 1, 2, v_\alpha(\cdot)$ — вещественнозначные непрерывные (ненулевые) функции на T^3 , а функция $\varepsilon(\cdot)$ определена как

$$\varepsilon(p) := \sum_{i=1}^3 (1 - \cos(2p_i)), \quad p = (p_1, p_2, p_3) \in T^3.$$

Легко можно проверить, что оператор H , действующий в гильбертовом пространстве $L_2(T^3)$, ограничен и самосопряжен.

Рассмотрим следующие точки из T^3 :

$$\begin{aligned}
 p_1^{(1)} &:= (0,0,0), \quad p_2^{(1)} := (\pi,0,0), \quad p_3^{(1)} := (0,\pi,0), \quad p_4^{(1)} := (0,0,\pi), \\
 p_5^{(1)} &:= (\pi,\pi,0), \quad p_6^{(1)} := (\pi,0,\pi), \quad p_7^{(1)} := (0,\pi,\pi), \quad p_8^{(1)} := (\pi,\pi,\pi), \\
 p_1^{(2)} &:= \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right), \quad p_2^{(2)} := \left(\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}\right), \quad p_3^{(2)} := \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}\right), \quad p_4^{(2)} := \left(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right), \\
 p_5^{(2)} &:= \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}\right), \quad p_6^{(2)} := \left(\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right), \quad p_7^{(2)} := \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right), \quad p_8^{(2)} := \left(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}\right).
 \end{aligned}$$

Очевидно, что функция $\varepsilon(\cdot)$ имеет невырожденный нулевой минимум в точках $p_i^{(1)} \in T^3$, $i = \overline{1,8}$ и невырожденный максимум в точках $p_i^{(2)} \in T^3$, $i = \overline{1,8}$, равный 6.

Ясно, что оператор возмущения $V_1 + V_2$ оператора H_0 является самосопряженным двумерным оператором. Поэтому из известной теоремы Г. Вейля о сохранении существенного спектра при возмущениях конечного ранга вытекает, что существенный спектр $\sigma_{\text{ess}}(H)$ оператора H совпадает с существенным спектром оператора H_0 . Можно показать, что $\sigma_{\text{ess}}(H_0) = [0,6]$. Из последних двух фактов следует, что $\sigma_{\text{ess}}(H) = [0,6]$.

Сформулируем следующее условие для дальнейших рассуждений.

Условие 1. Предположим, что при $\alpha, \beta \in \{1,2\}$, $\alpha \neq \beta$ функция $v_\alpha(\cdot)$ является периодической по каждому переменным с периодом π , а функция $v_\beta(\cdot)$ удовлетворяет условию

$$\int_{T^3} v_\beta(t)g(t)dt = 0 \quad (1)$$

для каждой функции $g \in L_2(T^3)$ являющийся периодической по каждому переменным с периодом π .

Отметим, что функции вида

$$v_1(p) = \sum_{i=1}^3 c_i \cos(p_i), \quad v_2(p) = \sum_{i=1}^3 d_i \cos(2p_i), \quad p = (p_1, p_2, p_3) \in T^3,$$

где c_i, d_i , $i = 1,2,3$ — любые вещественные числа, удовлетворяют условию (1) с параметрами $\alpha = 2, \beta = 1$.

Действительно, пусть $g \in L_2(T^3)$ есть функция как в условии 1. Тогда имеем

$$\int_{T^3} v_1(t)g(t)dt = \int_{T^3} v_1(t + \bar{\pi})g(t + \bar{\pi})dt = - \int_{T^3} v_1(t)g(t)dt, \quad \bar{\pi} := (\pi, \pi, \pi),$$

из которого вытекает справедливость равенства (1).

Наряду с оператором H , рассмотрим также ограниченный и самосопряженный оператор H_α , действующий в гильбертовом пространстве $L_2(T^3)$ по формуле $H_\alpha := H_0 - V_\alpha$, $\alpha = 1,2$. При условии 1 дискретный спектр оператора H совпадает с объединением дискретных спектров операторов H_1 и H_2 .

Для удобства введем следующие постоянные $m_1 = 0$ и $m_2 = 6$. Пусть $C(T^3)$ — банахово пространство непрерывных функций, определенных на T^3 .

Определение. Пусть $\alpha = 1,2$. Говорят, что оператор H_α имеет резонанс с энергией m_α , если число 1 является собственным значением интегрального оператора

$$(G_\alpha \psi)(p) = (-1)^{\alpha+1} \mu_\alpha \int_{T^3} \frac{v_\alpha(t)\psi(t)dt}{\varepsilon(t) - m_\alpha}, \quad \psi \in C(T^3),$$

и по крайней мере одна (с точностью до константы) соответствующая собственная функция ψ удовлетворяет условию $\psi(p_i^{(\alpha)}) \neq 0$ при некотором $i \in \{1, \dots, 8\}$.

Далее будем предполагать, что все частные производные второго порядка функции $v_\alpha(\cdot)$ непрерывны в T^3 .

Теперь перейдем к формулировке основного результата настоящей работы.

Теорема. Пусть выполняется условие 1. Верны следующие утверждения.

1) Если числа 0 и 6 являются пороговыми собственными значениями оператора H_1 и H_2 соответ-

ственно, то $W(H) = \sigma(H) = [0,6]$;

2) Если число $z = 0$ является пороговым собственным значением оператора H_1 , а оператор H_2 имеет резонанс с энергией $z = 6$, то $W(H) = [0,6]$;

3) Если оператор H_1 имеет резонанс с энергией $z = 0$ и число $z = 6$ является пороговым собственным значением оператора H_2 , то $W(H) = (0,6]$;

4) Если оператор H_1 и H_2 имеет резонансы с энергиями 0 и 6, соответственно, то $W(H) = (0,6)$.

Схема доказательства: Можно проверить, что при $\alpha = 1,2$ функция

$$f_\alpha(p) = \frac{(-1)^\alpha \mu_\alpha v_\alpha(p) C}{\varepsilon(p) - m_\alpha}$$

удовлетворяет уравнению $H_\alpha f_\alpha = m_\alpha f_\alpha$, где C произвольное постоянное.

Пусть

$$|p| := \sqrt{(p^{(1)})^2 + (p^{(2)})^2 + (p^{(3)})^2}, \quad p = (p^1, p^2, p^3) \in T^3;$$

$$U_\delta(p_0) := \{p \in T^3 : |p - p_0| < \delta\}, \quad p_0 \in T^3, \quad \delta > 0.$$

Так как функция $\varepsilon(\cdot)$ имеет невырожденный нулевой минимум в точках $p_i^{(1)} \in T^3, i = \overline{1,8}$ и невырожденный максимум в точках $p_i^{(2)} \in T^3, i = \overline{1,8}$, равный 6, существуют числа $C_1^{(\alpha)}, C_2^{(\alpha)} > 0$ и $\delta > 0$ такие, что

$$C_1^{(\alpha)} |p - p_i^{(\alpha)}|^2 \leq \varepsilon(p) - m_\alpha \leq C_2^{(\alpha)} |p - p_i^{(\alpha)}|^2, \quad p \in U_\delta(p_i^{(\alpha)}), \quad i = \overline{1,8}. \quad (2)$$

Если $v_\alpha(p_i^{(\alpha)}) = 0$ при некотором $i = \overline{1,8}$, то существуют числа $C_1^{(\alpha)}, C_2^{(\alpha)} > 0, n_i^{(\alpha)} \in N$ и $\delta > 0$ такие, что

$$C_1^{(\alpha)} |p - p_i^{(\alpha)}|^{n_i^{(\alpha)}} \leq v_\alpha(p) \leq C_2^{(\alpha)} |p - p_i^{(\alpha)}|^{n_i^{(\alpha)}}, \quad p \in U_\delta(p_i^{(\alpha)}). \quad (3)$$

Положим

$$\mu_\alpha^0 := (-1)^{\alpha+1} \left(\int_{T^3} \frac{v_\alpha^2(t) dt}{\varepsilon(t) - m_\alpha} \right)^{-1}, \quad \alpha = 1,2.$$

Отметим, что [8] число $z = m_\alpha$ является (пороговым) собственным значением оператора H_α тогда и только тогда, когда $\mu_\alpha = \mu_\alpha^0$ и $v_\alpha(p_i^{(\alpha)}) = 0$ при всех $i = \overline{1,8}$. В этом случае $f_\alpha \in L_2(T^3)$ и $m_\alpha \in W(H)$. Кроме того, оператор H_α имеет резонанс с энергией m_α тогда и только тогда, когда $\mu_\alpha = \mu_\alpha^0$ и $v_\alpha(p_i^{(\alpha)}) \neq 0$ при некотором $i \in \{1, \dots, 8\}$. При этом $f_\alpha \in L_1(T^3) \setminus L_2(T^3)$ и $m_\alpha \notin W(H)$. Эти рассуждение основаны на соотношении (2) и (3).

Следуя схеме работы [8], можно убедиться, что если оператор H_α имеет резонанс с энергией m_α или число $z = m_\alpha$ является (пороговым) собственным значением оператора H_α , то имеет место равенство $\sigma(H) = [0,6]$.

Литература:

1. O. Toeplitz. Das algebraische Analogon zu einem Satze von Fejer // Math. Z., — 1918, — V. 2, — no. 1–2, — P. 187–197.
2. H. Langer, A. S. Markus, V.I. Matsaev, C. Tretter. A new concept for block operator matrices: the quadratic numerical range // Linear Algebra Appl., — 2001, — V. 330, — no. 1–3, P. 89–112.
3. L. Rodman, I. M. Spitkovsky. Ratio numerical ranges of operators // Integr. Equ. Oper. Theory, — 2011, V. 71, — P. 245–257.
4. M. T. Heydari. Numerical range and compact convex sets // Rend. Circ. Mat. Palermo, 60 (2011), 139–143.
5. H.-L. Gau, C.-K. Li, Y.-T. Poon, N.-S. Sze. Higher rank numerical ranges of normal matrices // SIAM J. Matrix Anal. Appl., 32 (2011), 23–43.
6. B. Kuzma, C.-K. Li, L. Rodman. Tracial numerical range and linear dependence of operators // Electronic J. Linear Algebra, 22 (2011), 22–52.
7. K. Gustafson, D. K. M. Rao. Numerical range: The field of values of linear operators and matrices. Springer, Berlin, 1997, 205 p.

8. Т.Х. Расулов. Асимптотика дискретного спектра одного модельного оператора, ассоциированного с системой трех частиц на решетке. Теоретическая и математическая физика. 163:1 (2010), 34–44.

Уравнение Вайнберга для собственных функций модельного оператора, ассоциированного с системой трех частиц на решетке

Расулов Тулкин Хусенович, кандидат физико-математических наук, доцент;
 Мухитдинов Рамазон Тухтаевич, кандидат физико-математических наук, доцент
 Бухарский государственный университет (Узбекистан)

Рассматривается модельный оператор H , ассоциированный с системой трех частиц на решетке, взаимодействующих с помощью парных нелокальных потенциалов. Получен аналог уравнения Вайнберга для собственных функций оператора H .

Ключевые слова: модельный оператор, нелокальный потенциал, уравнение Вайнберга, собственное значение и собственная функция, существенный спектр.

1. Введение. Исследование дискретных спектров операторов Шредингера является наиболее интенсивно изучаемым объектом в теории операторов. Одним из важных вопросов в спектральном анализе таких операторов является изучение конечности числа собственных значений, лежащих вне существенного спектра. Хорошо известно, что при некоторых естественных предположениях оператор Шредингера A системы трех попарно взаимодействующих частиц в непрерывном пространстве имеет существенный спектр, совпадающий с полуосью $[k, \infty)$, где $k \leq 0$. В работах [1] и [2] доказано, что при $k < 0$ и достаточно быстром убывании потенциалов взаимодействия в координатном представлении дискретный спектр оператора является конечным. Методика [1] основана на исследовании Фредгольмовской системы уравнений Фаддеева и Вайнберга, а в работе [2] применялись вариационные соображения.

Вопросу конечности дискретного спектра трехчастичного дискретного оператора Шредингера посвящены многие работы, например [3,4]. Отметим, что в работе [3] пользуясь уравнениями типа Фаддеева и Вайнберга, а также аналитическим продолжением определителя Фредгольма, доказана конечность дискретного спектра трехчастичного дискретного оператора Шредингера парными контактными взаимодействиями при отсутствии виртуальных уровней у операторов, описывающих двухчастичных подсистем.

В работе [5] рассматривается модельный оператор H действующий в гильбертовом пространстве квадратично интегрируемых симметричных функций, определенных на $(T^3)^2$. Этот модель ассоциирован с системой трех частиц на решетке, взаимодействующих с помощью парных нелокальных потенциалов. Там построен «симметризованный» вариант известного уравнения Вайнберга, с помощью которого доказывается конечность дискретного спектра оператора H . Следует отметить, что этот метод используется даже в том случае, когда существенный спектр модельного оператора H имеет лауну. Тем самым оно является удобным методом доказательства конечности дискретного спектра.

В данной работе рассматривается несимметризованный аналог оператора H изученный в работе [5] и строится соответствующее уравнение, представляющее собой аналог известного уравнения Вайнберга, для собственных функций. Здесь ядра нелокальных операторов взаимодействия имеют ранг 1 и роль двухчастичного дискретного оператора Шредингера играет модель Фридрихса. Напомним, что для периодического оператора нелокальные потенциалы представляют собой сумму локального потенциала и некоторого конечномерного оператора. Отметим, что для многочастичных гамильтонианов нелокальные потенциалы в импульсном представлении являются частично-интегральными операторами. При этом получено очень мало результатов для таких гамильтонианов в том случае, когда ядро частично-интегрального оператора является невырожденным. В настоящее время представляет интерес получение точных результатов хотя бы для частных случаев, т. е. для нелокальных потенциалов с вырожденными ядрами. Так как двухчастичные и трехчастичные уравнения Шредингера легко разрешимы для нелокальных взаимодействий, их часто используют в ядерной физике и в многочастичных проблемах. Они также используются систематически вместе с уравнениями Фаддеева и Вайнберга для систем трех частиц.

2. Модельный оператор. Через C, R, Z, N обозначим множества всех комплексных, вещественных, целых и натуральных чисел, соответственно. Пусть $d \in N$ и $T^d := [-\pi; \pi]^d$ — d -мерный куб с соответствующим отождествлением противоположных граней. Всюду в работе T^d рассматривается как абелева группа, в которой операции сложения и умножения на вещественное число введены как операции сложения и умножения на вещественное число в R^d по модулю $(2\pi Z)^d$. Например, если

$$a = \left(\frac{\pi}{2}, \dots, \frac{\pi}{2}\right), \quad b = \left(\frac{2\pi}{3}, \dots, \frac{2\pi}{3}\right) \in T^d,$$

то

$$a + b = \left(-\frac{5\pi}{6}, \dots, -\frac{5\pi}{6}\right), \quad 6a = (\pi, \dots, \pi) \in T^d.$$

Пусть $L_2((T^d)^n)$ — гильбертово пространство квадратично интегрируемых (комплекснозначных) функций, определенных на $(T^d)^n$, $n = 1, 2$.

Рассмотрим модельный оператор H , действующий в гильбертовом пространстве $L_2((T^d)^2)$ по формуле

$$H = H_0 - V_1 - V_2,$$

где операторы $H_0, V_\alpha, \alpha = 1, 2$ определяются по правилам:

$$(H_0 f)(p, q) = \varepsilon(p, q) f(p, q), \quad f \in L_2((T^d)^2);$$

$$(V_1 f)(pq) = \mu_1 \varphi_1(q) \int_{T^d} \varphi_1(t) f(p, t) dt; \quad f \in L_2((T^d)^2);$$

$$(V_2 f)(pq) = \mu_2 \varphi_2(q) \int_{T^d} \varphi_2(t) f(p, t) dt; \quad f \in L_2((T^d)^2).$$

Здесь $\mu_\alpha > 0, \alpha = 1, 2, \varepsilon(\cdot, \cdot)$ вещественно-непрерывные функции на T^d и $(T^d)^2$, соответственно. Видно, что нелокальные операторы взаимодействия V_1 и V_2 являются частичными интегральными операторами с вырожденными ядрами ранга 1.

Можно легко проверить, что в этих предположениях модельный оператор H является ограниченным и самосопряженным в гильбертовом пространстве $L_2((T^d)^2)$.

Известно, что в импульсном представлении трехчастичный дискретный оператор Шредингера \hat{H} действует в гильбертовом пространстве $L_2((T^d)^2)$. После выделения полного квазиимпульса системы $K \in T^d$ оператор \hat{H} разлагается в прямой операторный интеграл (см. например [3, 4])

$$\hat{H} = \int_{T^d} \oplus \hat{H}(K) dK,$$

где ограниченный самосопряженный оператор $\hat{H}(K), K \in T^d$ действует в гильбертовом пространстве $L_2(\Gamma_K)$ ($(\Gamma_K \subset (T^d)^2$ — некоторое многообразие). Отметим, что модельный оператор \hat{H} обладает основными спектральными свойствами трехчастичного дискретного оператора Шредингера $\hat{H}(0)$, см. например [6–8].

Учитывая выше сказанные факты оператора H можно рассматривать как модельный оператор, ассоциированный системой трех частиц на решетке, взаимодействующих с помощью парных нелокальных потенциалов.

3. Уравнение Вайнберга для собственных функций. Пусть C — множество комплексных чисел. Положим

$$\varepsilon_1(p, q) := \varepsilon(p, q), \quad \varepsilon_2(p, q) := \varepsilon(p, q),$$

$$m_\alpha(p) := \min_{q \in T^d} \varepsilon_\alpha(p, q), \quad M_\alpha(p) := \max_{q \in T^d} \varepsilon_\alpha(p, q), \quad \alpha = 1, 2.$$

При каждом фиксированном $p \in T^d$ определим регулярную в $C \setminus [m_\alpha(p), M_\alpha(p)]$ функцию

$$\Delta_\alpha(p; z) := 1 - \mu_\alpha \int_{T^d} \frac{\varphi_\alpha^2(t) dt}{\varepsilon_\alpha(p, t) - z}.$$

Обозначим через σ_α множество тех точек $z \in C$, для которых имеет место равенство $\Delta_\alpha(p; z) = 0$ хотя бы для одной $p \in T^d$ и

$$m := \min_{p, q \in T^d} \varepsilon(p, q), \quad M := \max_{p, q \in T^d} \varepsilon(p, q).$$

Следующая теорема описывает местоположение существенного спектра модельного оператора H .

Теорема 1. Для существенного спектра $\sigma_{\text{ess}}(H)$ модельного оператора H справедливо равенство

$$\sigma_{\text{ess}}(H) = \sigma_1 \cup \sigma_2 \cup [m, M].$$

Определение. Множества $\sigma_1 \cup \sigma_2$ и $[m, M]$ называются, соответственно, «двухчастичной» и «трехчастичной» ветвями существенного спектра модельного оператора H .

При каждом $z \in C \setminus \sigma_{\text{ess}}(H)$ рассмотрим интегральный оператор $W(z)$ действующий в пространстве $L_2((T^d)^2)$ с ядром

$$W(p, q, t, t', z) := \mu_1 \mu_2 \frac{\varphi_1(p) \varphi_2(q)}{\varepsilon(p, q) - z} \left[\frac{\varphi_1(t') \varphi_2(t)}{\Delta_1(p; z) (\varepsilon(p, t') - z)} + \frac{\varphi_1(t') \varphi_2(t)}{\Delta_2(p; z) (\varepsilon(t, q) - z)} \right]$$

(t, t' — переменные интегрирования).

Верна следующая теорема.

Теорема 2. Если $f \in L_2((T^d)^2)$ — собственная функция, соответствующая собственному значению $z \in C \setminus \sigma_{\text{ess}}(H)$ оператора H , то f удовлетворяет уравнению $W(z)f = f$, обычно называемое уравнением Вайнберга.

Доказательство. Пусть $z \in C \setminus \sigma_{\text{ess}}(H)$ собственное значение оператора H и $f \in L_2((T^d)^2)$ — соответствующая собственная функция. Тогда f удовлетворяет уравнению

$$(\varepsilon(p, q) - z)f(p, q) - \mu_1 \varphi_1(q) \int_{T^d} \varphi_1(t) f(p, t) dt - \mu_2 \varphi_2(q) \int_{T^d} \varphi_2(t) f(t, q) dt = 0 \tag{1}$$

Так как $z \notin [m, M]$, то из уравнения (1) для f имеем

$$f(p, q) = \frac{\mu_1 \varphi_1(q) g_1(p) + \mu_2 \varphi_2(q) g_2(p)}{\varepsilon(p, q) - z}, \tag{2}$$

где

$$g_1(p) := \int_{T^d} \varphi_1(t) f(p, t) dt, \quad g_2(q) := \int_{T^d} \varphi_2(t) f(t, q) dt. \tag{3}$$

Подставляя выражение (2) для f в равенств (3) и учитывая $z \in C \setminus \sigma_{\text{ess}}(H)$ получим

$$g_1(p) = \frac{\mu_2 \varphi_2(p)}{\Delta_1(p, z)} \int_{T^d} \frac{\varphi_1(t) g_2(t) dt}{\varepsilon(p, t) - z}, \tag{4}$$

$$g_2(q) = \frac{\mu_1 \varphi_1(q)}{\Delta_2(q, z)} \int_{T^d} \frac{\varphi_2(t) g_1(t) dt}{\varepsilon(t, q) - z}. \tag{5}$$

Теперь в равенстве (2) вместо g_α подставляя её выражение (4) и (5), затем пользуясь выражением (3) получим уравнение Вайнберга $W(z)f = f$. Теорема 2 доказана.

Отметим, что из положительности оператора $V := V_1 + V_2$ вытекает, что оператор H не имеет собственных значений на (M, ∞) . Далее, если при некоторых предположениях оператор $W(z)$ принадлежит классу Гильберта-Шмидта при $z \leq E_{\min} := \min \sigma_{\text{ess}}(H)$ и операторнозначная функция $W(\cdot)$ является непрерывным в равномерной операторной топологии в $(-\infty, E_{\min}]$, то пользуясь теоремой 2 можно доказать [5] конечность дискретного спектра оператора H , расположенного в $(-\infty, E_{\min})$.

Литература:

1. Д.Р. Яфаев. О конечности дискретного спектра трехчастичного оператора Шредингера // Теор. мат. физ., — 1975, — Т. 25, — №2, — с. 185–195.
2. Г.М. Жислин. О конечности дискретного спектра операторов энергии квантовых систем многих частиц // ДАН СССР, — 1972, — Т. 207, — № 1, 25–28.
3. Ж.И. Абдуллаев, С.Н. Лакаев. Конечность дискретного спектра трехчастичного оператора Шредингера на решетке // Теор. мат. физ., — 1997, — Т. 111, — № 1, — с. 94–108.
4. С.Н. Лакаев, М.Э. Муминов. Существенный и дискретный спектр трехчастичного оператора Шредингера на решетке // Теор. мат. физ., — 2003, — Т. 135, — №3, 478–503.

5. Т.Х. Расулов, Р.Т. Мухитдинов. Конечность дискретного спектра модельного оператора, ассоциированного с системой трех частиц на решетке // Известия вузов. Математика. — 2014, — №1, с. 61–70.
6. S. Albeverio, S. N. Lakaev, R. Kh. Djumanova. The essential and discrete spectrum of a model operator associated to a system of three identical quantum particles // Rep. Math. Phys., — 2009, — V. 63, — no. 3, 359–380.
7. S. Albeverio, S. N. Lakaev, Z. I. Muminov. On the number of eigenvalues of a model operator associated to a system of three-particles on a lattices. Russ. J. Math. Phys., — 2007, — V. 14, — no. 4, — P. 377–387.
8. Т.Х. Расулов. Асимптотика дискретного спектра одного модельного оператора, ассоциированного с системой трех частиц на решетке // Теор. мат. физ., — 2010, — Т. 163, — №1, 34–44.

Об одном свойстве уравнения Фаддеева для модельного трехчастичного дискретного оператора Шредингера

Расулов Тулкин Хусенович, кандидат физико-математических наук, доцент;
Рахронов Аскар Ахмадович, ассистент;
Турдиев Халим Хамроевич, ассистент
Бухарский государственный университет (Узбекистан)

В работе рассматривается модельный дискретный оператор Шредингера H описывающий системы трех квантовых частиц, движущихся на одномерной решетке и взаимодействующих с помощью парных не-локальных потенциалов. Построен аналог системы интегральных уравнений Фаддеева для собственных функций оператора H .

Ключевые слова: дискретный оператор Шредингера, нелокальный потенциал, уравнение Фаддеева, операторное уравнение, определитель Фредгольма, класс Гильберта-Шмидта.

Исследованию существенного спектра непрерывных и дискретных операторов Шредингера посвящены многие работы (см. например [1,2] и [3,4], соответственно). При этом один из основных инструментов при изучении существенного и дискретного спектра многочастичного оператора Шредингера является аналог уравнения Фаддеева и его симметризованный вариант. Заметим, что потенциалы, рассматриваемые в работах [3,4] являются локальными, т. е. операторами умножения на функцию в координатном представлении.

В настоящей статье изучен модельный дискретный оператор Шредингера H описывающий системы трех квантовых частиц, движущихся на одномерной решетке и взаимодействующих с помощью парных нелокальных потенциалов [1,2]. Отметим, что для многочастичных гамильтонианов нелокальные потенциалы в импульсном представлении являются частично-интегральными операторами. Построен аналог системы интегральных уравнений Фаддеева для собственных функций оператора H .

Пусть $T^d := (-\pi, \pi]^d$ — d -мерный тор с соответствующим отождествлением противоположных граней и $L_2^{\text{sym}}(T^2)$ — гильбертово пространство квадратично-интегрируемых (комплекснозначных) симметричных функций, определенных на T^2 .

В гильбертовом пространстве $L_2^{\text{sym}}(T^2)$, рассмотрим модельный дискретный оператор Шредингера H действующий по формуле

$$H := H_0 - \mu V_1 - \mu V_2 - \lambda V_3,$$

где H_0 — оператор умножения на функцию $\varepsilon(x+y)$ в $L_2^{\text{sym}}(T^2)$:

$$(H_0 f)(x, y) = \varepsilon(x+y) f(x, y), \quad \varepsilon(x) := 1 - \cos(x),$$

а V_α , $\alpha = 1, 2, 3$ — нелокальные операторы взаимодействия вида

$$(V_1 f)(x, y) = \int_T \cos(y-t) f(x, t) dt, \quad (V_2 f)(x, y) = \int_T \cos(x-t) f(t, y) dt,$$

$$(V_3 f)(x, y) = \int_T \cos(x+y-2t) f(t, x+y-t) dt.$$

Здесь $f \in L_2^{\text{sym}}(T^2)$ и $\mu, \lambda > 0$ произвольные вещественные постоянные.

При этих предположениях оператор H является ограниченным и самосопряженным в гильбертовом пространстве $L_2^{\text{sym}}(T^2)$.

Приведем несколько основных обозначений, которые будут применяться на работе. При каждом фиксированном $x \in T$ определим регулярные в области $C \setminus [m(x), M(x)]$ функцию

$$\Delta(x; z) := \Delta_1(x; z)\Delta_2(x; z) + (\Delta_3(x; z))^2,$$

где функции $\Delta_i(\cdot; \cdot)$, $i = 1, 2, 3$ определены следующим образом:

$$\Delta_1(x, z) := 1 - \mu \int_T \frac{\cos^2(t) dt}{\varepsilon(x+t) - z}, \quad \Delta_2(x, z) := 1 - \mu \int_T \frac{\sin^2(t) dt}{\varepsilon(x+t) - z}, \quad \Delta_3(x, z) := \mu \int_T \frac{\cos(t) \sin(t) dt}{\varepsilon(x+t) - z},$$

а числа $m(x)$ и $M(x)$ определяются равенствами

$$m(x) := \min_{y \in T} \varepsilon(x+y), \quad M(x) := \max_{y \in T} \varepsilon(x+y).$$

Пусть σ — множество тех точек $z \in C$, для которых равенство $\Delta(x; z) = 0$ имеет место хотя бы для одной $x \in T$ и $\Sigma := [0, 2] \cup \sigma$. Обозначим через I единичный оператор в $L_2(T)$ и положим

$$L_2^{(4)}(T) := \{g = (g_1, g_2, g_3, g_4) : g_i \in L_2(T), i = 1, 2, 3, 4\}, \quad I^{(4)} := \text{diag}\{I, I, I, I\}.$$

При каждом $z \in C \setminus [0, 2]$ вводим блочно-операторные матрицы (размера 4×4) $A(z)$ и $K(z)$, действующие в пространстве $L_2^{(4)}(T)$ по формулам

$$A(z) := \begin{pmatrix} A_{11}(z) & A_{12}(z) & 0 & 0 \\ A_{21}(z) & A_{22}(z) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & 0 & I \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad K(z) := \begin{pmatrix} K_{11}(z) & K_{12}(z) & K_{13}(z) & K_{14}(z) \\ K_{21}(z) & K_{22}(z) & K_{23}(z) & K_{24}(z) \\ K_{31}(z) & K_{32}(z) & K_{33}(z) & K_{34}(z) \\ K_{41}(z) & K_{42}(z) & K_{43}(z) & K_{44}(z) \end{pmatrix},$$

где $A_{ij}(z) : L_2(T) \rightarrow L_2(T)$, $i, j = 1, 2, z \in C \setminus [0, 2]$ — оператор умножения на функцию $a_{ij}(x, z)$:

$$a_{11}(x, z) := \Delta_1(x, z), \quad a_{12}(x, z) := a_{21}(x, z) := \Delta_3(x, z), \quad a_{22}(x, z) := \Delta_2(x, z),$$

а операторы $K_{ij}(z) : L_2(T) \rightarrow L_2(T)$, $i, j = 1, 2, 3, 4, z \in C \setminus [0, 2]$ — интегральные операторы с ядрами $K_{ij}(x, t; z)$ (t -переменная интегрирования)

$$\begin{aligned} K_{11}(x, t; z) &:= \frac{\mu \cos(x) \cos(t)}{\varepsilon(x+t) - z}; & K_{12}(x, t; z) &:= \frac{\mu \sin(x) \cos(t)}{\varepsilon(x+t) - z}; & K_{13}(x, t; z) &:= \frac{\lambda \cos(t-x) \cos(t)}{\varepsilon(t) - z}; \\ K_{14}(x, t; z) &:= \frac{\lambda \cos(t-x) \sin(t)}{\varepsilon(t) - z}; & K_{21}(x, t; z) &:= \frac{\mu \cos(x) \sin(t)}{\varepsilon(x+t) - z}; & K_{22}(x, t; z) &:= \frac{\mu \sin(x) \sin(t)}{\varepsilon(x+t) - z}; \\ K_{23}(x, t; z) &:= \frac{\lambda \sin(t-x) \cos(t)}{\varepsilon(t) - z}; & K_{31}(x, t; z) &:= \frac{2\lambda \cos(x) \cos(2t-x) \cos(x-t)}{\varepsilon(x) - z}; \\ K_{24}(x, t; z) &:= \frac{\lambda \sin(t-x) \sin(t)}{\varepsilon(t) - z}; & K_{32}(x, t; z) &:= \frac{2\mu \cos(x) \cos(2t-x) \sin(x-t)}{\varepsilon(x+y) - z}; \\ K_{41}(x, t; z) &:= \frac{2\mu \sin(x) \cos(2t-x) \cos(x-t)}{\varepsilon(x) - z}, & K_{ij}(z) &= 0, \quad i, j = 3, 4. \end{aligned}$$

Заметим, что при каждом $z \in C \setminus [0, 2]$ интегральные операторы $K_{ij}(z)$ принадлежат классу Гильберта-Шмидта, следовательно, $K(z)$ является компактным оператором.

Отметим, что при каждом $z \in C \setminus \Sigma$ оператор $A(z)$ обратим, поэтому для таких z мы можем определить оператор вида $T(z) := A^{-1}(z)K(z)$.

Следующая теорема устанавливает связь между собственными значениями операторов H и $T(z)$.

Теорема 1. Число $z \in C \setminus \Sigma$ является собственным значением оператора H тогда и только тогда, когда оператор $T(z)$ имеет собственное значение, равное единице, и их кратности совпадают.

Доказательство. Пусть $z \in C \setminus \Sigma$ – собственное значение оператора H и $f \in L_2^{\text{sym}}(\Gamma^2)$ – соответствующая собственная функция. Тогда функция f удовлетворяет уравнению $Hf = zf$ или

$$\begin{aligned}
 & (\varepsilon(x+y) - z)f(x, y) - \mu \int_{\Gamma} \cos(t) f(x, t) dt - \mu \int_{\Gamma} \sin(t) f(x, t) dt - \\
 & - \mu \int_{\Gamma} \cos(t) f(t, y) dt - \mu \int_{\Gamma} \sin(t) f(t, y) dt - \lambda \int_{\Gamma} \cos(2t) f(t, x+y-t) dt - \\
 & - \lambda \int_{\Gamma} \sin(2t) f(t, x+y-t) dt = 0.
 \end{aligned} \tag{1}$$

Так как $z \in C \setminus [0, 2]$, при всех $x, y \in \Gamma$ имеет место соотношение $\varepsilon(x+y) - z \neq 0$. Поэтому из уравнения (1) для f имеем равенство

$$\begin{aligned}
 f(x, y) = & \frac{\mu}{\varepsilon(x+y) - z} (\cos(y)\varphi_1(x) + \sin(y)\varphi_2(x) + \cos(x)\varphi_1(y) + \sin(x)\varphi_2(y)) + \\
 & + \frac{\lambda}{\varepsilon(x+y) - z} (\cos(x+y)\varphi_3(x+y) + \sin(x+y)\varphi_4(x+y)),
 \end{aligned} \tag{2}$$

где

$$\begin{cases} \varphi_1(x) := \int_{\Gamma} \cos(t) f(x, t) dt, \\ \varphi_2(x) := \int_{\Gamma} \sin(t) f(x, t) dt, \\ \varphi_3(x) := \int_{\Gamma} \cos(2t) f(t, x-t) dt, \\ \varphi_4(x) := \int_{\Gamma} \sin(2t) f(t, x-t) dt. \end{cases} \tag{3}$$

Подставляя выражение (2) для f в системе обозначений (3), получим, что система уравнений

$$\begin{aligned}
 \varphi_1(x) = & \mu \int_{\Gamma} \frac{\cos(t)}{\varepsilon(x+t) - z} (\cos(t)\varphi_1(x) + \sin(t)\varphi_2(x) + \cos(x)\varphi_1(t) + \sin(x)\varphi_2(t)) dt + \\
 & + \lambda \int_{\Gamma} \frac{\cos(t)}{\varepsilon(x+t) - z} (\cos(x+t)\varphi_3(x+t) + \sin(x+t)\varphi_4(x+t)) dt; \\
 \varphi_2(x) = & \mu \int_{\Gamma} \frac{\sin(t)}{\varepsilon(x+t) - z} (\cos(t)\varphi_1(x) + \sin(t)\varphi_2(x) + \cos(x)\varphi_1(t) + \sin(x)\varphi_2(t)) dt + \\
 & + \lambda \int_{\Gamma} \frac{\sin(t)}{\varepsilon(x+t) - z} (\cos(x+t)\varphi_3(x+t) + \sin(x+t)\varphi_4(x+t)) dt; \\
 \varphi_3(x) = & \mu \int_{\Gamma} \frac{\cos(2t)}{\varepsilon(x) - z} (\cos(x-t)\varphi_1(t) + \sin(x-t)\varphi_2(t) + \cos(t)\varphi_1(x-t) + \sin(t)\varphi_2(x-t)) dt + \\
 & + \lambda \int_{\Gamma} \frac{\cos(2t)}{\varepsilon(x) - z} (\cos(x)\varphi_3(x) + \sin(x)\varphi_4(x)) dt; \\
 \varphi_4(x) = & \mu \int_{\Gamma} \frac{\sin(2t)}{\varepsilon(x) - z} (\cos(x-t)\varphi_1(t) + \sin(x-t)\varphi_2(t) + \cos(t)\varphi_1(x-t) + \sin(t)\varphi_2(x-t)) dt + \\
 & + \lambda \int_{\Gamma} \frac{\sin(2t)}{\varepsilon(x) - z} (\cos(x)\varphi_3(x) + \sin(x)\varphi_4(x)) dt;
 \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned}
 & \left(1 - \mu \int_{\Gamma} \frac{\cos^2(t) dt}{\varepsilon(x+t) - z} \right) \varphi_1(x) - \mu \int_{\Gamma} \frac{\cos(t) \sin(t)}{\varepsilon(x+t) - z} dt \cdot \varphi_2(x) = \mu \cos(x) \int_{\Gamma} \frac{\cos(t)\varphi_1(t)}{\varepsilon(x+t) - z} dt + \\
 & + \mu \sin(x) \int_{\Gamma} \frac{\cos(t)\varphi_2(t)}{\varepsilon(x+t) - z} dt + \lambda \int_{\Gamma} \frac{\cos(t-x) \cos(t)\varphi_3(t)}{\varepsilon(t) - z} dt + \lambda \int_{\Gamma} \frac{\cos(t-x) \sin(t)\varphi_4(t)}{\varepsilon(t) - z} dt;
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\mu \int_T \frac{\cos(t) \sin(t)}{\varepsilon(x+t)-z} dt \cdot \varphi_1(x) + \left(1 - \mu \int_T \frac{\sin^2(t) dt}{\varepsilon(x+t)-z} \right) \varphi_2(x) = \mu \cos(x) \int_T \frac{\sin(t) \varphi_1(t)}{\varepsilon(x+t)-z} dt + \\
 & + \mu \sin(x) \int_T \frac{\sin(t) \varphi_2(t)}{\varepsilon(x+t)-z} dt + \lambda \int_T \frac{\sin(t-x) \cos(t) \varphi_3(t)}{\varepsilon(t)-z} dt + \lambda \int_T \frac{\sin(t-x) \sin(t) \varphi_4(t)}{\varepsilon(t)-z} dt; \\
 \varphi_3(x) & = \frac{2\mu \cos(x)}{\varepsilon(x)-z} \int_T \cos(2t-x) \cos(x-t) \varphi_1(t) dt + \frac{2\mu \cos(x)}{\varepsilon(x)-z} \int_T \cos(2t-x) \sin(x-t) \varphi_2(t) dt; \\
 \varphi_4(x) & = \frac{2\mu \sin(x)}{\varepsilon(x)-z} \int_T \cos(2t-x) \cos(x-t) \varphi_1(t) dt + \frac{2\mu \sin(x)}{\varepsilon(x)-z} \int_T \cos(2t-x) \sin(x-t) \varphi_2(t) dt.
 \end{aligned}$$

или же матричное уравнение

$$A(z)\varphi = K(z)\varphi \tag{4}$$

имеет нетривиальное решение тогда и только тогда, когда уравнение (1) имеет нетривиальное решение и линейные подпространства, порожденные решениями уравнений (1) и (4), имеют одинаковые размерности.

При каждом $z \in C \setminus \Sigma$ оператор $A(z)$ обратим, и следовательно, уравнение $\varphi = A^{-1}(z)K(z)\varphi$, т. е. уравнение $\varphi = T(z)\varphi$ имеет нетривиальное решение тогда и только тогда, когда уравнение (4) имеет нетривиальное решение. Здесь также линейные подпространства, порожденные решениями уравнений (4) и $\varphi = T(z)\varphi$, имеют одинаковые размерности. Теорема доказана.

Замечание. Отметим, что операторное уравнение $T(z)\varphi = \varphi$ обычно называется аналогом уравнения Фаддеева для собственных функций оператора H .

Один из важных применений уравнения Фаддеева $T(z)\varphi = \varphi$ для собственных функций оператора H можно видеть при доказательстве включения $\sigma_{\text{ess}}(H) \subset \Sigma$, см. [4]. Ещё другое важное применение симметричного варианта этого уравнения можно наблюдать при доказательстве конечности или бесконечности дискретного спектра оператора H .

Литература:

1. М. Рид, Б. Саймон. Методы современной математической физики. Т. 4. Анализ операторов, Москва: Мир, 1982 г.
2. Г.М. Жислин. Исследование спектра оператора Шредингера для системы многих частиц // Труды Московского математического общества. — 1960, — V. 9, — С. 81–120.
3. S. Albeverio, S. N. Lakaev, Z. I. Muminov. Schroedinger operators on lattices. The Efimov effect and discrete spectrum asymptotics // Ann. Henri Poincare. — 2004, — V. 5, — P. 743–772.
4. С.Н. Лакаев, М.Э. Муминов. Существенный и дискретный спектр трехчастичного оператора Шредингера на решетке // Теоретическая и математическая физика, — 2003, — Т. 135, — №3, с. 478–503.

0 спектре дополнения Шура одной операторной матрицы

Расулов Тулкин Хусенович, кандидат физико-математических наук, доцент;
Худаяров Санат Самадович, ассистент
Бухарский государственный университет (Узбекистан)

Рассматривается операторная матрица в прямой сумме нолчастичного, одночастичного и двухчастичного подпространств фоковского пространства. Изучаются некоторые свойства, в основном связанные с числами собственных значений, соответствующих дополнению Шура и приведены их следствия.

Ключевые слова: операторная матрица, первое и второе дополнение Шура, пространство Фока, существенный и дискретные спектры.

Блочно-операторная матрица — это матрица элементы которой являются линейными операторами в банаховом или гильбертовом пространстве [1]. Пусть H'_1, H'_2 и H'_3 — три гильбертовы пространства и $H := H'_1 \oplus H'_2 \oplus H'_3$. Тогда известно, что всякий линейный ограниченный оператор A , действующий в H всегда представляется как 3×3 блочно-операторная матрица

$$A := \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \tag{1}$$

с линейными ограниченными операторами $A_{ij} : H'_j \rightarrow H'_i, i, j = 1, 2, 3$. При этом оператор A является самосопряженным тогда и только тогда, когда

$$A_{ij} = A_{ij}^*, i \leq j, i, j = 1, 2, 3$$

(A_{ij}^* сопряженный оператор к A_{ij}).

Обозначим через $\sigma(\cdot), \sigma_{\text{ess}}(\cdot), \sigma_{\text{disc}}(\cdot)$ и $\rho(\cdot)$, соответственно, спектр, существенный спектр, дискретный спектр и резольвентное множества ограниченного самосопряженного оператора.

Далее, пространство H представим в виде ортогональной суммы гильбертовых пространств $H_1 := H'_1 \oplus H'_2$ и $H_2 := H'_3$. Положим

$$B_{11} := \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}, B_{12} := \begin{pmatrix} A_{13} \\ A_{23} \end{pmatrix}, B_{21} := (A_{31} \ A_{32}), B_{22} := A_{33}.$$

Очевидно, что $B_{ij} : H_j = H_i, i, j = 1, 2$. Тогда оператор A действующий в H относительно представление $H = H_1 \oplus H_2$ записывается как блочно-операторная матрица следующего вида:

$$A = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} \tag{2}$$

Пусть C — множество комплексных чисел и $L(H)$ — пространство линейных ограниченных операторов в гильбертовом пространстве H . Следующие операторы

$$S_1 : C \setminus \sigma(B_{22}) \rightarrow L(H_1), S_1(\lambda) := B_{11} - \lambda - B_{12}(B_{22} - \lambda)^{-1}B_{21}, \lambda \in \rho(B_{22});$$

$$S_2 : C \setminus \sigma(B_{11}) \rightarrow L(H_2), S_2(z) := B_{22} - \lambda - B_{21}(B_{11} - \lambda)^{-1}B_{12}, z \in \rho(B_{11});$$

называются дополнениями Шура соответствующий блочно-операторной матрицы A , определенный по формуле (2) и они играют важную роль в спектральном анализе этой матрицы. Видно, что дополнение Шура являются операторно-значные регулярные функции определенные вне спектров операторов B_{22} и B_{11} , соответственно.

Дополнение Шура сначала использовано в теории матриц [2]. Термин «дополнение Шура» было введено в работе [3]. В бесконечномерных гильбертовых пространствах, дополнение Шура впервые изучена в известной работе М. Г. Крейна [4] о расширениях самосопряженных операторов. Исходя их применениях в теории матриц и численной линейной алгебры, дополнение Шура использованы во многих областях математики такие как статистика, электротехника, C^* -алгебры [5] и теория математических систем [6].

В теории ограниченных и неограниченных блочно-операторных матриц дополнение Шура является мощным инструментом при изучении спектра и различных спектральных свойств. Эти свойства впервые была исследованы в работах Р. Нагела [7,8].

Соотношение между спектральных свойств блочно-операторной матрицы A и дополнение Шура можно наблюдать из так называемой «факторизация Фробениуса-Шура», т. е.,

$$A - \lambda = \begin{pmatrix} I & B_{12}(B_{22} - \lambda)^{-1} \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_1(\lambda) & 0 \\ 0 & B_{22} - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ (B_{22} - \lambda)^{-1}B_{21} & I \end{pmatrix}, \lambda \in \sigma(B_{22});$$

$$A - \lambda = \begin{pmatrix} I & 0 \\ B_{21}(B_{11} - \lambda)^{-1} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{11} - \lambda & 0 \\ 0 & S_2(\lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & (B_{11} - \lambda)^{-1}B_{12} \\ 0 & I \end{pmatrix}, \lambda \in \sigma(B_{11});$$

(см. например [1]). При этом $\sigma(A) \setminus \sigma(B_{22}) = \sigma(S_1)$ и $\sigma(A) \setminus \sigma(B_{11}) = \sigma(S_2)$. Здесь для регулярной оператор-функции $S : \Omega \rightarrow H(\Omega \subset C - \text{открытое множество})$ его спектр понимается как

$$\sigma(S) := C \setminus \rho(S), \rho(S) := \{ \lambda \in \Omega : S(\lambda) \text{ биективен в } H \}.$$

В работе [9] существенный спектр блочно-операторной матрицы определен в терминах дополнение Шура. Затем многие работы посвящены на этот объект. Для подробных изложений см. монографию [1].

Следует отметить, что включение $\sigma(B_{22}) \subset \sigma(A)$ не всегда выполняется, а дополнение Шура $S_1(\lambda)$ определена при $\lambda \notin \sigma(B_{22})$. В настоящей работы рассмотрим модель A , возникающий в задачах статистической физики [10], квантовой теории поля [11] и физики твердого тела [12], который представляется как (1). При этом имеет место включение $\sigma(B_{22}) \subset \sigma_{\text{ess}}(A)$. Изучаются свойства оператор-функции $S_1(\lambda)$ о спектре и приведены их следствия.

Пусть $T^d := (-\pi, \pi]^d$ d -мерный куб с соответствующим отождествлением противоположных граней, $L_2((T^d)^n)$ — гильбертово пространство квадратично-интегрируемых (комплекснозначных) функций, определенных на $(T^d)^n, n = 1, 2$. Рассмотрим случай, когда $H'_1 = C, H'_2 = L_2(T^d)$ и $H'_3 = L_2((T^d)^2)$. Пространства H'_1, H'_2 и H'_3 называются нольчастичным, одночастичным и двухчастичным подпространством стандартного фоковского пространства $F(L_2(T^d))$ по $L_2(T^d)$, соответственно, где

$$F(L_2(T^d)) := C \oplus L_2(T^d) \oplus L_2((T^d)^2) \oplus L_2((T^d)^3) \oplus \dots$$

Всюду в работе будем рассматривать блочно-операторную матрицу A , определенную по формуле (1), со следующими матричными элементами

$$A_{11}f_1 = \omega_1 f_1, A_{12}f_2 = \int_{T^d} \mathcal{G}_1(t) f_2(t) dt, A_{13} = 0;$$

$$A_{21} = A_{12}^*, (A_{22}f_2)(p) = \omega_2(p) f_2(p), (A_{23}f_3)(p) = \int_{T^d} \mathcal{G}_2(t) f_3(p, t) dt;$$

$$A_{31} = 0, A_{32} = A_{23}^*, (A_{33}f_3)(p, q) = \omega_3(p, q) f_3(p, q).$$

Здесь $f_i \in H'_i, i = 1, 2, 3; \omega_1$ -фиксированное вещественное число; $\omega_2(\cdot), \mathcal{G}_i(\cdot), i = 1, 2$ и $\omega_3(\cdot, \cdot)$ — вещественно-непрерывные функции на T^d и $(T^d)^2$, соответственно. При этом

$$A_{12}^* : H'_1 \rightarrow H'_2, (A_{12}^* f_1)(p) = \mathcal{G}_1(p) f_1, f_1 \in H'_1;$$

$$A_{23}^* : H'_2 \rightarrow H'_3, (A_{23}^* f_2)(p, q) = \mathcal{G}_2(q) f_2(p), f_2 \in H'_2.$$

Можно легко проверить, что при этих предположениях блочно-операторная матрица A является ограниченным и самосопряженным оператором в H .

Операторы A_{12}, A_{23} называются операторами уничтожения, а операторы A_{12}^*, A_{23}^* называются операторами рождения.

Простые вычисления показывают, что первое дополнение Шура $S_1(\lambda)$ блочно-операторной матрицы A (действующее по формуле (2)) соответствующее разложению $H = H_1 \oplus H_2$, определяется следующим образом

$$S_1(\lambda) = \begin{pmatrix} S_{11}(\lambda) & A_{12} \\ A_{12}^* & S_{22}(\lambda) \end{pmatrix}, \lambda \in \rho(A_{33}),$$

где

$$S_{11}(\lambda) := A_{11} - \lambda, S_{22}(\lambda) := A_{22} - \lambda - A_{23}(A_{33} - \lambda)^{-1} A_{23}^*.$$

При каждом фиксированном $p \in T^d$ определим регулярную в $C \setminus [m(p), M(p)]$ функцию

$$\Delta(p; \lambda) := \omega_2(p) - \lambda - \int_{T^d} \frac{\mathcal{G}_2^2(t) dt}{\omega_3(p, t) - \lambda},$$

где числа $m(p)$ и $M(p)$ определяются следующим образом:

$$m(p) := \min_{q \in T^d} \omega_3(p, q), \quad M(p) := \max_{q \in T^d} \omega_3(p, q).$$

Тогда $S_{22}(\lambda)$ есть оператор умножения на функцию $\Delta(\cdot; \lambda)$. Следует отметить, что при каждом фиксированном λ оператор типа (3) является оператором, носящим название обобщенной модели Фридрикса.

Пусть σ — замыкание множество точек $\lambda \in C$, для которых уравнение $\Delta(p; \lambda) = 0$ имеет решение хотя бы для одной $p \in T^d$ и

$$E_{\min} := \min_{p,q \in T^d} \omega_3(p,q), \quad E_{\max} := \max_{p,q \in T^d} \omega_3(p,q).$$

Тогда для существенного спектра оператора A имеет место равенство

$$\sigma_{\text{ess}}(A) = \sigma \cup [E_{\min}, E_{\max}].$$

Из непрерывности функции $\Delta(\cdot; \lambda)$ при $\lambda \in C \setminus [E_{\min}, E_{\max}]$ на компактном множестве T^d следует, что $\sigma_{\text{ess}}(S_1(\lambda)) = \text{Ran}(\Delta(\cdot; \lambda))$.

Следующие две свойства устанавливают связь между дискретным и существенным спектрами операторов A и $S_1(\lambda)$.

Свойства 1. Число $\lambda \in C \setminus [E_{\min}, E_{\max}]$ является собственным значением оператора A тогда и только тогда, когда оператор $S_1(\lambda)$ имеет собственное значение, равное нулю и их кратности совпадают.

Свойства 2. Пусть $\lambda \in C \setminus [E_{\min}, E_{\max}]$. Тогда $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A) \Leftrightarrow 0 \in \sigma_{\text{ess}}(S_1(\lambda))$.

Из свойств 1 и 2 вытекает следующие

Следствие 1. Пусть $\lambda \in C \setminus [E_{\min}, E_{\max}]$. Тогда $\lambda \in \rho(A) \Leftrightarrow 0 \in \rho(S_1(\lambda))$.

Следствие 2. Пусть $\lambda_0 \in R \setminus [E_{\min}, E_{\max}]$. Если $(\lambda_0, \lambda_0 + \gamma) \in \rho(A)$ (соот. $(\lambda_0 - \gamma, \lambda_0) \in \rho(A)$) при некотором $\gamma > 0$, то существует число $\delta = \delta(\gamma) > 0$ такое, что $(0, \delta) \in \rho(S_1(\lambda_0))$ (соот. $(-\delta, 0) \in \rho(S_1(\lambda_0))$).

Отметим, что при каждом фиксированном $\lambda \in R \setminus \sigma_{\text{ess}}(A)$ оператор $S_1(\lambda)$ является самосопряженным. Через $\tau_{\text{ess}}(A)$ обозначим нижнюю грань существенного спектра оператора A .

Свойства 3. При $\lambda < \tau_{\text{ess}}(A)$ число собственных значений оператора A , с учетом кратности, меньших чем λ , равно числу положительных собственных значений оператора $S_1(\lambda)$, с учетом кратности.

Литература:

1. C. Tretter. Spectral Theory of Block Operator Matrices and Applications. Imperial College Press, 2008.
2. I. Schur. Über potenzreihen, die im innern des einheitskreises beschränkt sind. J. Reine Angew. Math., 147 (1917), 205–232.
3. E. V. Haynsworth. Determination of the inertia of a partitioned Hermitian matrix. Linear Algebra Appl., 1:1 (1968), 73–81.
4. М. Г. Крейн. Теория самосопряженных расширений полуограниченных эрмитовых операторов и ее приложения. Матем. сборник, 20 (1947), 365–404.
5. F. Zhang. The Schur complement and its applications. Vol. 4 of Numerical Methods and Algorithms. Springer, New York, 2005.
6. H. Bart, I. C. Gohberg, M. A. Kaashoek, A. C. V. Ran. Schur complements and state space realizations. Linear Algebra Appl., 399 (2005), 203–224.
7. R. Nagel. Well-posedness and positivity for systems of linear evolution equations. Confer. Sem. Mat. Univ. Bari, 203 (1985), 1–29.
8. R. Nagel. The spectrum of unbounded operator matrices with non-diagonal domain. J. Func. Anal., 89:2 (1990), 291–302.
9. F. V. Atkinson, H. Langer, R. Menniken, A. A. Shkalikov. The essential spectrum of some matrix operators. Math. Nachr., 167 (1994), 5–20.
10. В. А. Малышев, Р. А. Минлос. Кластерные операторы. Труды семинара им. И. Г. Петровского. Вып. 9 (1983), 63–80.
11. К. О. Фридрихс. Возмущение спектра операторов в гильбертовом пространстве. М.: Мир, 1969.
12. D. Mattis. The few-body problem on a lattice. Rev. Modern Phys., 58:2 (1986), 361–379.

Числовой образ линейных операторов: основные свойства и примеры

Расулов Тулкин Хусенович, кандидат физико-математических наук, доцент;

Худаяров Санат Самадович, ассистент
Бухарский государственный университет (Узбекистан)

В настоящей работе сформулированы основные свойства числового образа линейного оператора в комплексном гильбертовом пространстве. Приведены несколько примеров разного характера для вычисления числового образа.

Ключевые слова: числовой образ, выпуклые множества, матрица, линейный оператор, точечный и аппроксимативно точечный спектры, ядро спектра, оператор левого сдвига, неравенство Коши-Буняковского.

1. Введение. Пусть H комплексное гильбертово пространство и $A: H \rightarrow H$ линейный оператор с областью определения $D(A) \subset H$. Множество

$$W(A) := \{(Ax, x) : x \in D(A), \|x\| = 1\}$$

называется *числовой образ* оператора A . Из определения видно, что множество $W(A)$ является подмножеством комплексной плоскости и геометрические свойства множества $W(A)$ дает некоторые информации об операторе A .

Изучение числового образа линейного оператора в гильбертовом пространстве является одним из основных методов при исследовании местоположения спектра таких операторов. Это понятие впервые введено в работе [1] и доказано, что числовой образ матрицы содержит все ее собственные значения. В работе [2] показано, что числовой образ линейного оператора является выпуклым. Отметим, что выше сказанные результаты верны не только для матриц, но и в более общем случае для любого линейного ограниченного оператора. В работе [3] доказано, что спектр произвольного линейного ограниченного оператора содержится в замыкании числового образа этого оператора. Вслед за этим это понятие обобщено разными способами, см. например [4–6].

Числовой образ матриц хорошо изучены во многих работах, см. например [7,8]. В частности, в работе [7] доказано, что числовой образ матрицы 2×2 есть эллипс. Отметим, что [7] в случае, когда оператор является ограниченным и самосопряженным, замыкание числового образа есть выпуклая оболочка спектра.

Данная работа посвящена изучению основных свойств числового образа линейного оператора. Вычислен числовой образ нескольких линейных операторов разного характера.

2. Основные свойства. В этом пункте ради удобства для читателей сформулируем некоторых свойств числового образа линейного оператора.

Пусть N, R и C — множество натуральных, вещественных и комплексных чисел, соответственно. Обозначим через $\sigma(\cdot)$, $\sigma_p(\cdot)$ и $\sigma_{\text{app}}(\cdot)$, соответственно, спектр, точечный спектр и аппроксимативно точечный спектр линейного оператора. Всюду в работе под (\cdot, \cdot) и $\|\cdot\|$ понимается скалярное произведение и норма в соответствующих гильбертовых пространствах.

Свойства 1 (Теорема Тёплица-Хаусдорфа): Числовая образ линейного оператора есть выпуклая множества.

Свойства 2: $W(A) \subset R$ тогда и только тогда, когда A самосопряженный оператор.

Свойства 3: Пусть A самосопряженный оператор и $W(A) = [m, M]$ для некоторых $m, M \in R$. Тогда имеет место равенство $\|A\| = \max\{|m|, |M|\}$.

Свойства 4: Пусть $\overline{W(A)} = [m, M]$. Тогда $m, M \in \sigma(A)$.

Свойства 5: Имеет место включение $\sigma_p(A) \subset W(A)$.

Определим (см. [8]) аппроксимативно точечный спектр линейного оператора A как

$$\sigma_{\text{app}}(A) := \left\{ \lambda \in C : \exists \{x_n\}_1^\infty \subset D(A), \|x_n\| = 1, (A - \lambda)x_n \rightarrow 0, n \rightarrow \infty \right\}$$

Подчеркнем, что последнее множество имеет еще одно название, «ядро спектра» A (см. [10]).

Следующее свойства устанавливает связь между $\sigma_{\text{app}}(A)$ и $W(A)$:

Свойства 6: Имеет место соотношение $\sigma_{\text{app}}(A) \subset \overline{W(A)}$.

Следующий пример показывает, что даже для ограниченного самосопряженного оператора B в гильбертовом пространстве H мы не сможем утверждать, что $\sigma(B) \subset W(A)$ или $W(B) \subset \sigma(B)$.

Пусть

$$B : l_2 \rightarrow l_2, \quad Bx = (x_1, \frac{1}{2}x_2, \dots, \frac{1}{n}x_n, \dots), \quad x = (x_1, \dots, x_n, \dots) \in l_2.$$

Легко проверяется, что

$$\sigma(B) = \overline{\left\{1, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{n}, \dots\right\}} = \left\{0, 1, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{n}, \dots\right\}, \quad W(B) = (0, 1].$$

Остановимся, на доказательство факта $0 \notin W(B)$. Допустим противное. Пусть $0 \in W(B)$. Тогда существует $x = (x_1, x_2, \dots, x_n, \dots) \in l_2$ такое, что $\|x\| = 1$ и $(Bx, x) = 0$. Имеем

$$(Bx, x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} |x_k|^2 = 0.$$

Отсюда следует, что $x \equiv 0$. Это противоречит факту $\|x\| = 1$. Значит $0 \notin W(B)$. Следовательно, в этом случае имеем $\sigma(B) \not\subset W(B), W(B) \not\subset \sigma(B)$.

3. Примеры. В этом пункте рассмотрим некоторые примеры на вычисление числового образа линейного ограниченного оператора.

1. Пусть H комплексное гильбертово пространство, а $\lambda \in C$ некоторое фиксированное комплексное число. Тогда для числового образа оператора $A_1 : H \rightarrow H, A_1x = \lambda x$ имеет место равенство $W(A_1) = \{\lambda\}$.

Действительно, если $x \in H, \|x\| = 1$, тогда $(A_1x, x) = \lambda(x, x) = \lambda\|x\|^2 = \lambda$, т. е. $W(A_1) = \{\lambda\}$.

2. Вычислить числовой образ оператора $A_2 : R^2 \rightarrow R^2, A_2(x_1, x_2) = (ax_1, bx_2)$, где a и b произвольные вещественные числа.

Возьмем произвольный элемент $x = (x_1, x_2) \in R^2, \|x\|^2 = 1, x_1^2 + x_2^2 = 1$. Тогда $(A_2x, x) = ax_1^2 + bx_2^2$. Если обозначить $x_1^2 = t$, тогда $x_2^2 = 1 - t$, где $t \in [0, 1]$. Поэтому

$$(A_2x, x) = at + b(1 - t) = b + (a - b)t.$$

Так как $t \in [0, 1]$, то $W(A_2) = [\min\{a, b\}, \max\{a, b\}]$.

3. Вычислить числовой образ оператора $A_3 : C^2 \rightarrow C^2, A_3(z_1, z_2) = (z_2, 0)$.

Возьмем произвольный элемент $z = (z_1, z_2) \in C^2$ координаты которого удовлетворяют условию $|z_1|^2 + |z_2|^2 = 1$. Обозначим $\arg z_k = \varphi_k, k = 1, 2$. Тогда $z_k = |z_k|e^{i\varphi_k}, k = 1, 2$. Теперь рассмотрим квадратную форму (Az, z) для элементов $z \in C^2, \|z\| = 1$:

$$(A_3z, z) = \overline{z_1}z_2 = |z_1|e^{-i\varphi_1}|z_2|e^{i\varphi_2} = |z_1||z_2|e^{i(\varphi_2 - \varphi_1)}.$$

Здесь $\varphi_2 - \varphi_1 \in (0, 2\pi]$. Если обозначить $|z_1| = t$, тогда $|z_2| = \sqrt{1 - t^2}$ и $0 \leq t \leq 1$. Поэтому

$$(A_3z, z) = e^{i(\varphi_2 - \varphi_1)} t \sqrt{1 - t^2}.$$

Видно, что когда $\varphi_2 - \varphi_1$ пробегает от 0 до 2π квадратная форма (A_3z, z) описывает окружность с центром в начале координат и с радиусом $t\sqrt{1 - t^2}$. Тогда объединение таких окружностей по $t \in [0, 1]$ дает множество $W(A_3)$. Учитывая $\max_{0 \leq t \leq 1} t\sqrt{1 - t^2} = \frac{1}{2}$ получим, что множество $W(A_3)$ есть круг с центром в начале координат и с радиусом $1/2$, т. е.

$$W(A_3) = \{\lambda \in C : |\lambda| \leq \frac{1}{2}\}.$$

4. Числовой образ оператора $A_4 : C^2 \rightarrow C^2, (A_4z_1, z_2) = (z_2, z_1)$ вычисляется как в примере 3 и верно

$W(A_4) = \{\lambda \in C : |\lambda| \leq 1\}$ (вычислить самостоятельно).

5. Покажем, что для числового образа оператора левого сдвига

$$A_5 : l_2 \rightarrow l_2, \quad A_5(x_1, x_2, \dots, x_n, \dots) = (x_2, x_3, \dots, x_{n+1}, \dots)$$

имеет место равенство $W(A_5) = U := \{\lambda \in C : |\lambda| < 1\}$.

Очевидно, что для каждого $\lambda \in U$ вектор $x_\lambda := (1, \lambda, \lambda^2, \lambda^3, \dots)$ принадлежит в l_2 и $A_5 x_\lambda = \lambda x_\lambda$, т. е. каждое $\lambda \in U$ является собственным значением оператора A_5 и соответствующий собственный вектор равно x_λ . Тогда $U \subset W(A_5)$. Так как $\|A_5\| = 1$, имеем $W(A_5) \subset \bar{U}$. Поэтому достаточно показать, что ни одна точка единичной окружности не лежит в $W(A_5)$. Допустим противное, т. е. пусть некоторое комплексное число λ с модулю 1 лежат в $W(A_5)$. Тогда существует элемент $x \in H$ такое, что $\|x\| = 1$ и $\lambda = (A_5 x, x)$. Так как $\|A_5\| = 1$, согласно неравенству Коши-Буняковского имеет место соотношение $1 = |\lambda| = |(A_5 x, x)| \leq \|A_5 x\| \|x\| \leq \|x\|^2 = 1$. Отсюда вытекает, что $A_5 x = \lambda x$. Легко можно проверить, что уравнению $A_5 x = \lambda x$ удовлетворяет только $x = x_\lambda$. С другой стороны $|\lambda| = 1$, поэтому $x = x_\lambda \notin l_2$. Это противоречие показывает, что $\lambda \notin W(A_5)$.

6. Пусть отображение $A_6 : C^2 \rightarrow C^2$ представляется в виде

$$A_6 = \begin{pmatrix} r & b \\ 0 & -r \end{pmatrix}, \quad r \in R, \quad b \in C.$$

Допустим, что (f, g) — единичный вектор в C^2 , т. е.

$$f = e^{i\alpha} \cos(\theta), \quad g = e^{i\beta} \sin(\theta), \quad \alpha \in [0, \frac{\pi}{2}], \quad \beta \in [0, 2\pi).$$

Тогда

$$A_6 f = (re^{i\alpha} \cos(\theta) + be^{i\beta} \sin(\theta), -re^{i\beta} \sin(\theta))$$

и

$$(A_6 f, f) = r(\cos^2(\theta) - \sin^2(\theta)) + be^{i(\beta-\alpha)} \sin(\theta) \cos(\theta) = x + iy,$$

$$x := r \cos(\theta) + \frac{|b|}{2} \sin(2\theta) \cos(\beta - \alpha + \gamma), \quad y := \frac{|b|}{2} \sin(\beta - \alpha + \gamma) \sin(2\theta), \quad \gamma = \arg(b).$$

Таким образом

$$(x - r \cos(2\theta))^2 + y^2 = \frac{|b|^2}{4} \sin^2(2\theta).$$

Последнее есть семейства окружностей, берем их объединение.

Перепишем последнее выражение в следующем виде

$$(x - r \cos(\varphi))^2 + y^2 = \frac{|b|^2}{4} \sin^2(\varphi), \quad 0 \leq \varphi \leq \pi$$

и дифференцируя по φ получим

$$(x - r \cos(\varphi))r = \frac{|b|^2}{4} \cos(\varphi).$$

Из последних двух выражений получим

$$\frac{x^2}{r^2 + \frac{|b|^2}{4}} + \frac{y^2}{\frac{|b|^2}{4}} = 1.$$

Это и есть эллипс.

Литература:

1. O. Toeplitz. Das algebraische Analogon zu einem Satze von Fejer // Math. Z. — 1918, — V. 2, — no. 1–2, — pp. 187–197.
2. F. Hausdorff. Der Wertvorrat einer Bilinearform // Math. Z. — 1919, — V. 3, — no. 1, — pp. 314–316.
3. A. Wintner. Zur Theorie der beschränkten Bilinearformen // Math. Z. — 1929, — V. 30, — no. 1, — pp. 228–281.
4. H. Langer, A. S. Markus, V. I. Matsaev, C. Tretter. A new concept for block operator matrices: the quadratic numerical range // Linear Algebra Appl. — 2001, — V. 330, — no. 1–3, — pp. 89–112.
5. C. Tretter, M. Wagenhofer. The block numerical range of an $n \times n$ block operator matrix // SIAM J. Matrix Anal. Appl. — 2003, — V. 24, — no. 4, — pp. 1003–1017.
6. L. Rodman, I. M. Spitkovsky. Ratio numerical ranges of operators // Integr. Equ. Oper. Theory. — 2011, — V. 71, — pp. 245–257.
7. K. Gustafson, D. K. M. Rao. Numerical range: The field of values of linear operators and matrices. Berlin, Springer, 1997.
8. D. S. Keeler, L. Rodman, I. M. Spitkovsky. The numerical range of 3×3 matrices // Linear Algebra and its Appl. — 1997, — V. 252, — no. 1–3, — pp. 115–139.
9. М. Рид, Б. Саймон. Методы современной математической физики. Т. 4. Анализ операторов. М. Мир, 1982.
10. М. Саломьяк, М. Бирман. Спектральная теория самосопряженных операторов в гильбертовом пространстве. Ленинград, Изд. Ленинградского университета, 1980.

Об одном применении леммы Морса

Расулов Тулкин Хусенович, кандидат физико-математических наук, доцент;

Ширинова Махлиё Улугбековна, студент

Бухарский государственный университет (Узбекистан)

В настоящей работе изучается обобщенная модель Фридрихса. На примере рассматриваемого оператора, с помощью леммы Морса получено разложение соответствующего определителя Фредгольма.

Ключевые слова: обобщенная модель Фридрихса, пространство Фока, определитель Фредгольма, лемма Морса.

Поведения определителя Фредгольма для двухчастичного дискретного оператора Шредингера изучены в работах [1–3], а для семейства модели Фридрихса с одномерным возмущением, которые ассоциированы с системой двух частиц на решетке изучен в работах [4,5]. Как известно, что некоторые актуальные задачи, в частности, задачи квантовой механики, статистической механики и гидродинамики сводятся к исследованию спектральных свойств обобщенной модели Фридрихса [6,7]. Поэтому изучение поведения определителя Фредгольма для обобщенной модели Фридрихса играет важную роль в современной математической физике. При этом лемма Морса о локальном приведении гладкой вещественнозначной функции к каноническому виду в окрестности невырожденной критической точки является основным инструментом. Это лемма красива сама по себе и важна в приложениях. Лемма Морса является один из основных результатов теории Морса, названной по имени разработчика теории и установившего данный результат в 1925 году американским математиком Х. К. М. Морса (1892–1977).

Ради удобства для читателей сначала сформулируем лемму Морса [8].

Лемма Морса. Пусть $G \subset \mathbb{R}^m$ — открытое множество, функция $f : G \rightarrow \mathbb{R}$ принадлежит классу $C^{(3)}(G)$ и $x_0 \in G$ невырожденная критическая точка этой функции. Тогда существует диффеоморфизм $g : V \rightarrow U$ отображающее некоторое окрестность V точки $0 \in \mathbb{R}^m$ в окрестность U точки x_0 такое, что

$$(f(g))(y) = f(x_0 - [y_1^2 + \dots + y_k^2] + [y_{k+1}^2 + \dots + y_m^2])$$

для любых $y \in V$.

Пусть T^3 — трехмерный тор, C — одномерное комплексное пространство, $L_2(T^3)$ — гильбертово пространство квадратично-интегрируемых (комплекснозначных) функций, определенных на T^3 . Обозначим через H прямую сумму пространств $H_0 := C$ и $H_1 := L_2(T^3)$, т. е. $H := H_0 \oplus H_1$.

Рассмотрим обобщенную модель Фридрикса $h(k), k \in T^3$, действующую в гильбертовом пространстве H по формуле

$$(h(k)f)_0 = u(k)f_0 + \int_{T^3} \mathcal{G}(t)f_1(t)dt; (h(k)f)_1(p) = \mathcal{G}(p)f_0 + \omega(k, p)f_1(p).$$

Здесь $f \in (f_0, f_1), f_i \in H_i, i = 0, 1, u(\cdot)$ и $\mathcal{G}(\cdot)$ - вещественнозначные непрерывные функции на T^3 , а функция $\omega(\cdot, \cdot)$ - вещественнозначная непрерывная симметрическая функция на $(T^3)^2$. Очевидно, что оператор $h(k), k \in T^3$ ограничен и самосопряжен в H

Отметим, что обобщенная модель Фридрикса $h(k), k \in T^3$ обладает основными спектральными свойствами двухчастичного дискретного оператора Шредингера (см. например [9]). По этой причине гильбертово пространство H называется двухчастичным обрезанным подпространством Фоковского пространства, а обобщенная модель Фридрикса $h(k)$ называется гамильтонианом системы с не более чем двумя частицами на решетке.

Для точной формулировки нужного нам результата, приведем несколько условий:

Условие 1. а) Функция $\omega(\cdot, \cdot)$ является четной в $(T^3)^2$ по совокупности переменных $k, p \in T^3, (\omega(-k, -p) = \omega(k, p))$, имеет единственный невырожденный минимум в точке $(0, 0) \in (T^3)^2$ и все частные производные четвертого порядка функции $\omega(\cdot, \cdot)$ непрерывны в $(T^3)^2$;

б) Существуют положительно определенная матрица W , числа $l_1, l_2 (l_1 > 0, l_2 \neq 0)$ такие, что

$$\left(\frac{\partial^2 \omega(0, 0)}{\partial k_i \partial k_j} \right)_{i, j=1}^3 = l_1 W, \left(\frac{\partial^2 \omega(0, 0)}{\partial k_i \partial p_j} \right)_{i, j=1}^3 = l_2 W.$$

Из условия 1 вытекает, что $l_1 > |l_2|$.

Условие 2. Функции $u(\cdot)$ и $\mathcal{G}(\cdot)$ четны, а также функция $u(\cdot)$ имеет единственный минимум в точке $0 \in T^3$.

Замечание 1. Условия 1–2 выполняются в случае, когда

$$u(k) = \varepsilon(k) + 1, \omega(k, p) = \varepsilon(k) + \varepsilon(k + p) + \varepsilon(p), \mathcal{G}(k) = \text{const},$$

где функция $\varepsilon(\cdot)$ определена по формуле $\varepsilon(k) = 3 - \cos k_1 - \cos k_2 - \cos k_3$.

При каждом фиксированном $k \in T^3$ определим регулярную в $C \setminus [m(k), M(k)]$ функцию (определитель Фредгольма, ассоциированный с оператором $h(k), k \in T^3$)

$$\Delta(k; z) := u(k) - z - \int_{T^3} \frac{\mathcal{G}^2(t)dt}{\omega(k, t) - z},$$

где числа $m(k)$ и $M(k)$ определяются следующим образом:

$$m(k) := \min_{p \in T^3} \omega(k, p), M(k) := \max_{p \in T^3} \omega(k, p).$$

В силу условия 1 функция $\omega(\cdot, \cdot)$ имеет единственный невырожденный минимум в точке $(0, 0) \in (T^3)^2$ ($m := \omega(0, 0)$), а функция $\mathcal{G}(\cdot)$ является аналитической на T^3 по предположению, поэтому существует конечный интеграл

$$\int_{T^3} \frac{\mathcal{G}^2(t)dt}{\omega(k, t) - m}, k \in T^3.$$

Из теоремы о предельном переходе под знаком интеграла Лебега следует, что

$$\Delta(0; m) = \lim_{k \rightarrow 0} \Delta(k; m).$$

Положим

$$C_+ := \{z \in C : \text{Re}(z) > 0\}, R_+ := \{x \in R : x > 0\}, R_+^0 := R_+ \cup \{0\},$$

$$B_\delta(0) := \{p \in T^3 : |p| < \delta\}, \delta > 0.$$

Теперь сформулируем результат о разложении определителя Фредгольма.

Теорема 1. Пусть выполнены условия 1–2. Существует число $\delta > 0$, такое, что для любых $k \in B_\delta(0)$ и

$z \leq m(k)$ имеет место представление

$$\Delta(k; z) = \Delta(0; m) + 4\sqrt{2}\pi^2 g^2(0) l_1^{\frac{3}{2}} (\det W)^{\frac{1}{2}} \sqrt{m(k) - z} + \Delta^{(1)}(m(k) - z) + \Delta^{(1)}(k, z),$$

где $\Delta^{(1)}(m(k) - z) = O(m(k))$ при $|m(k) - z| \rightarrow 0$ и $\Delta^{(1)}(k; z) = O(|k|^2)$ при $k \rightarrow 0$ равномерно по $z \leq m(k)$.

Доказательство. Пусть функция $\omega_0(\cdot, \cdot)$ определена в $B_\delta(0) \times T^3$ как

$$\omega_0(k, p) := \omega(k, p + p_0(k)) - m(k),$$

где $p_0(\cdot) \in C^{(3)}(B_\delta(0))$ и для любого $k \in B_\delta(0)$ точка $p_0(k)$ является точкой невырожденного минимума.

При каждом $k \in B_\delta(0)$ определим аналитическую функцию $D(k, \cdot)$ в C_+ по формуле

$$D(k, \zeta) := u(k) - m(k) + \zeta^2 - \int_{T^3} \frac{g^2(t + p_0(k)) dt}{\omega(k, t) + \zeta^2}.$$

Так как $m(\cdot) \in C^{(3)}(B_\delta(0))$ в силу определения функции $D(\cdot, \cdot)$ условие 1,2 получим, что функция $D(\cdot, \zeta)$ принадлежит классу $C^{(2)}(B_\delta(0))$ для любых $\zeta \in C_+$.

Пользуясь разложением

$$\omega_0(k, p) = \frac{l_1}{2} (Wp, p) + o(|k||p|^2) + o(|p|^2)$$

при $k, p \rightarrow 0$ получим, что существует число $C > 0$ такое, что при всех $\zeta \in R_+^0$ и $i, j = 1, 2, 3$ имеет место неравенства

$$\left| \frac{\partial^2}{\partial k_i \partial k_j} \frac{g^2(p + p_0(k))}{\omega_0(k, p) + \zeta^2} \right| \leq \frac{C}{|p|^2}, \quad k, p \in B_\delta(0), \tag{1}$$

$$\left| \frac{\partial^2}{\partial k_i \partial k_j} \frac{g^2(p + p_0(k))}{\omega_0(k, p) + \zeta^2} \right| \leq \frac{C}{|p|^2}, \quad k \in B_\delta(0), \quad p \in T^3 \setminus B_\delta(0). \tag{2}$$

В силу теоремы Лебега о предельном переходе имеем

$$\frac{\partial^2}{\partial k_i \partial k_j} D(k, 0) = \lim_{\zeta \rightarrow +0} \frac{\partial^2}{\partial k_i \partial k_j} D(k, \zeta).$$

Применяя лемму Адамара получим, что

$$D(k, \zeta) = D(0, \zeta) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial k_i} D(0, \zeta) k_i + \sum_{i,j=1}^3 H_{ij}(k, \zeta) k_i k_j,$$

где при каждом $\zeta \in R_+^0$ функция $H_{ij}(\cdot, \zeta), i, j = 1, 2, 3$ является непрерывной в $B_\delta(0)$ и

$$H_{ij}(k, \zeta) = \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial^2}{\partial k_i \partial k_j} D(x_1 x_2 k, \zeta) dx_1 dx_2.$$

В силу неравенств (1) и (2) имеем

$$\left| H_{ij}(k, \zeta) \right| \leq \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial^2}{\partial k_i \partial k_j} D(x_1 x_2 k, \zeta) dx_1 dx_2 \leq C \left(1 + \int_{B_\delta(0)} \frac{g^2(t + p_0(k)) dt}{t^2} \right)$$

для любых $k \in B_\delta(0)$ равномерно по $\zeta \in R_+^0$.

При каждом $\zeta \in C_+$ функция $D(\cdot, \zeta)$ является четной в $B_\delta(0)$ и поэтому

$$\left[\frac{\partial}{\partial k_i} D(0, \zeta) \right]_{k=0} = 0, \quad i = 1, 2, 3.$$

Таким образом, при каждом $\zeta \in C_+$ функция $D(\cdot, \zeta)$ принадлежит классу $C^{(2)}(B_\delta(0))$ и имеет место разложе-

ние $D(k, \zeta) = D(0, \zeta) + D^{\text{res}}(k, \zeta)$, где $D^{\text{res}}(k, \zeta) = O(|p|^2)$ при $p \rightarrow 0$ равномерно по $\zeta \in R_+^0$.

Теперь докажем, что существует правая производная от $D(0, \cdot)$ в точке $\zeta = 0$ и имеет место оценка

$$|D(0, \zeta) - D(0, 0)| < C\zeta, \quad \zeta \in R_+^0; \quad (3)$$

$$\left| \frac{\partial}{\partial \zeta} D(0, \zeta) - \frac{\partial}{\partial \zeta} D(0, 0) \right| < C\zeta, \quad \zeta \in R_+^0; \quad (4)$$

для некоторого $C > 0$.

Действительно, функцию $D(0, \cdot)$ можно представить в виде $D(0, \zeta) = D_1(\zeta) + D_2(\zeta)$,

где

$$D_1(\zeta) := - \int_{B_\delta(0)} \frac{\mathcal{G}^2(t) dt}{\omega_0(0, t) + \zeta^2}, \quad D_2(\zeta) := u(0) - m + \zeta^2 - \int_{T^3 \setminus B_\delta(0)} \frac{\mathcal{G}^2(t) dt}{\omega_0(0, t) + \zeta^2}, \quad \zeta \in C_+.$$

Так как функция $\omega_0(0, \cdot)$ является непрерывной в компактном множестве $T^3 \setminus B_\delta(0)$

и имеет единственный минимум в точке $q = 0$ существует число $M > 0$ такое, что $|\omega_0(0, p)| > M$ для любых $p \in T^3 \setminus B_\delta(0)$. Тогда из $\mathcal{G}(\cdot) \in C^{(1)}(T^3)$ вытекает, что

$$|D_2(\zeta) - D_2(0)| \leq C\zeta^2, \quad \zeta \in R_+^0 \quad (5)$$

для некоторого $C = C(\delta) > 0$.

Рассмотрим следующий разность

$$D_1(\zeta) - D_1(0) = -\zeta^2 \int_{B_\gamma(0)} \frac{\mathcal{G}^2(t) dt}{(\omega_0(0, t) + \zeta^2)\omega_0(0, t)}. \quad (6)$$

Функция $\omega_0(0, \cdot)$ имеет единственный невырожденный минимум в точке $p = 0$.

Следовательно, в силу леммы Морса существует взаимно-однозначное отображение

$p = \varphi(t)$ из $B_\gamma(0)$ в некоторую окрестность $U(0)$ точки $p = 0$ такое, что

$$\omega_0(0, \varphi(t)) = t^2, \quad (7)$$

где $\varphi(0) = 0$ и для Якобиана $J_\varphi(t)$ отображении $p = \varphi(t)$ имеет место равенство $J_\varphi(0) = \sqrt{2}l_1^{\frac{3}{2}}(\det W)^{\frac{1}{2}}$.

В интеграле (6) делая замену переменных $p = \varphi(t)$ и пользуясь равенством (7) имеем

$$D_1(\zeta) - D_1(0) = -\zeta^2 \int_{B_\gamma(0)} \frac{\mathcal{G}^2(\varphi(t))J_\varphi(t) dt}{t^2(t^2 + \zeta^2)}. \quad (8)$$

В интеграле (8) переходя в сферическую систему координат $t = r\omega$ запишем ее в виде

$$D_1(\zeta) - D_1(0) = -\zeta^2 \int_0^\gamma \frac{F(r) dr}{r^2 + \zeta^2},$$

где $F(r) := \int_{S^2} \mathcal{G}^2(\varphi(r\omega))J_\varphi(r\omega) d\omega$, S^2 — единичная сфера в R^3 , а $d\omega$ элемент единичной сферы. Учитывая

факты $\mathcal{G}(\cdot) \in C^2(T^3)$ и $J_\varphi(\cdot) \in C^{(1)}(B_\gamma(0))$ имеем

$$|F(r) - F(0)| \leq Cr. \quad (9)$$

Теперь согласно оценки (9) получим

$$\lim_{\zeta \rightarrow +0} \frac{D_1(\zeta) - D_1(0)}{\zeta} = 4\sqrt{2}\pi^2 l_1^{\frac{3}{2}} \mathcal{G}^2(0)(\det W)^{\frac{1}{2}}.$$

Следовательно, существует правая производная функции $D_1(\cdot)$ в точке $\zeta = 0$ и

$$\frac{\partial}{\partial \zeta} D_1(0) = 4\sqrt{2}\pi^2 l_1^{\frac{3}{2}} \mathcal{G}^2(0)(\det W)^{\frac{1}{2}}.$$

Таким образом,

$$|D_1(\zeta) - D_1(0)| < C\zeta, \quad \zeta \in R_+^0 \quad (10)$$

для некоторого $C > 0$.

Тогда из неравенств (5) и (10) следует, что существует правая производная функции $D(0, \cdot)$ в точке $\zeta = 0$ и

$$\frac{\partial}{\partial \zeta} D(0,0) = 4\sqrt{2}\pi^2 l_1^{\frac{3}{2}} g^2(0) (\det W)^{\frac{1}{2}}. \text{ Сопоставляя неравенства (5) и (10) получим (3). Аналогично доказывает-}$$

ся оценка (4). Теперь утверждение теоремы вытекает из равенства $\Delta(k, z) = D(k, \sqrt{m(k) - z})$, $z \leq m(k)$. Теорема доказана.

Литература:

1. S. Albeverio, S. N. Lakaev, K. A. Makarov, Z. I. Muminov. The threshold effects for the two-particle Hamiltonians in lattice // Comm. Math. Phys. — 2006, — V. 262, P. 91–115.
2. S. Albeverio, S. N. Lakaev, Z. I. Muminov. Schroedinger operators on lattices. The Efimov effect and discrete spectrum asymptotics // Ann. Henri Poincare, — 2005, — V. 5, — P. 743–772.
3. Абдуллаев, Ж. И., Лакаев С. Н., Асимптотика дискретного спектра разностного трехчастичного оператора Шредингера на решетке // Теор. и мат. физ., — 2003, — Т. 136, — №2, с. 231–245.
4. S. Albeverio, S. N. Lakaev, Z. I. Muminov. The threshold effects for a family of Friedrichs models under rank one perturbations // J. Math. Anal. Appl. — 2007, — V. 330, — P. 1152–1168.
5. Т.Х. Расулов Т.Х. Асимптотика дискретного спектра одного модельного оператора, ассоциированного с системой трех частиц на решетке // Теор. и матем. физ. — 2010, — Т. 163, — №1, с. 34–44.
6. Л.Д. Фаддеев. О модели Фридрихса в теории возмущений непрерывного спектра // Труды Мат. Инс-та АН СССР, — 1964, — Т. 73, — с. 292–313.
7. Р.А. Минлос, Я.Г. Синай. Исследование спектров стохастических операторов, возникающих в решетчатых моделях газа // Теор. и матем. физ. — 1979, — Т. 2, — №2, — с. 230–243.
8. В.А. Зорич. Математический анализ. Часть I. Изд-во ФАЗИС, Москва, 1997.
9. S. Albeverio, S. N. Lakaev, T. H. Rasulov. The Efimov Effect for a Model Operator Associated with the Hamiltonian of a non Conserved Number of Particles // Methods Func. Anal. Topol. — 2007, — V. 13, — no. 1, — P. 1–16.

О достаточном условии конечности числа собственных значений двухканальной молекулярно-резонансной модели

Расулов Тулкин Хусенович, кандидат физико-математических наук, доцент
Бухарский государственный университет (Узбекистан)

Рассматривается самосопряженная обобщенная модель Фридрихса A , которая ассоциирована гамильтонианом системы, состоящей из не более чем двух частиц. Обсуждается случай, когда существенный спектр оператора A может содержать лакуны. Получено достаточное условие конечности дискретного спектра оператора A .

Ключевые слова: обобщенная модель Фридрихса, молекулярно-резонансная модель, блочно-операторная матрица, операторы рождения и уничтожения, лакуна существенного спектра.

В настоящей работе рассматривается гамильтониан A описывающий двухканальной молекулярно-резонансной модели [1–5]. В настоящей заметке найдено достаточное условие конечности дискретного спектра оператора A . Следует отметить, что некоторые актуальные задачи анализа, математической физики и теории вероятностей сводятся к исследованию спектра рассматриваемой модели. В [1–5] изучены спектр и резонансы аналогичных гамильтонианов.

Через C , R и N обозначим множества всех комплексных, вещественных и натуральных чисел, соответственно. Пусть D_i , $i = 1, \dots, n$, ($n \in N$) — ограниченная область с евклидовой мерой в d -мерном пространстве R^d , а также $D_i \cap D_j = \emptyset$, $i \neq j$ и $D := \bigcup_{i=1}^n \overline{D}_i$.

Пусть $H := H_0 \oplus H_1$ — двухканальное гильбертово пространства, состоящее из одномерного гильбертово пространства $H_0 := C$ (канал 1) и ядерного гильбертово пространства $H_1 := L_2(D)$ — квадратично-интегрируемых (комплекснозначных) функций, определенных на D (канал 2). Элементы пространства H представляются как векторы $f = (f_0, f_1)$, где $f_0 \in H_0$ и $f_1 \in H_1$. Для двух элементов $f = (f_0, f_1), g = (g_0, g_1) \in H$, их скалярное произведение $(f, g) := (f_0, g_0)_0 + (f_1, g_1)_1$ в H естественно определяется через скалярные произведения

$$(f_0, g_0)_0 := \overline{f_0} g_0, \quad (f_1, g_1)_1 := \int_D f_1(t) \overline{g_1(t)} dt.$$

Рассмотрим гамильтониан A , действующий в гильбертовом пространстве H как 2×2 блочно-операторная матрица

$$A := \begin{pmatrix} A_{00} & A_{01} \\ A_{01}^* & A_{11} \end{pmatrix}, \tag{1}$$

где матричные элементы $A_{ij} : H_j \rightarrow H_i$, $i \neq j$, $i, j = 0, 1$ определяются по формулам

$$A_{00} f_0 = w f_0, \quad A_{01} f_1 = \int_D v(t) f_1(t) dt,$$

$$A_{11} := A_{11}^0 - K, \quad (A_{11}^0 f_1)(p) = \int_D K(p, t) f_1(t) dt.$$

Здесь $f_i \in H_i$, $i = 0, 1$; w — фиксированное вещественное число, $v(\cdot)$ и $K(\cdot, \cdot)$ — вещественнозначные ограниченные функции на D и D^2 , соответственно, $u(\cdot)$ — вещественнозначная кусочно-непрерывная и ограниченная функция на D . В этих предположениях на параметры оператор A , действующий в гильбертовом пространстве H , является ограниченным и самосопряженным. При этом $A_{01}^* : H_0 \rightarrow H_1$ сопряженный оператор к A_{01} и

$$(A_{01}^* f_0)(p) = v(p) f_0, \quad f_0 \in H_0.$$

Оператор A_{01} называется оператором уничтожения, а A_{01}^* называется оператором рождения. Оператор уничтожения снижает количество частиц в заданном состоянии на единицу, а оператор рождения увеличивает число частиц в данном состоянии на единицу, и является сопряженным к оператору уничтожения. Такие операторы имеют широкое применение в квантовой механике, в частности, при изучении квантовых гармонических осцилляторов и систем многих частиц [6].

Следует отметить, что обобщенная модель Фридрикса A также называется двухканальной молекулярно-резонансной моделью [1], которая ассоциирована гамильтонианом системы, состоящей из не более чем двух частиц. Например, если

$$K(p, q) = -\sum_{i=1}^k \varphi_i(p) \psi_i(q),$$

то эти частицы взаимодействуют как с помощью нелокального потенциала, так и с помощью операторов рождения и уничтожения. В работе [2] показано существование и аналитичность собственных значений оператора типа (1) в случае $k = 1$.

Цель нашей работы — нахождение достаточного условия конечности дискретного спектра обобщенной модели Фридрикса A , определенной по формуле (1). При этом результат полученной для A_{11} в работе [7] переносится на A . Заметим, что характер спектра, структура резольвенты, вид собственных векторов дискретного и непрерывного спектра, проблема существования и полноты волновых операторов полностью или частично изучались в литературе применительно к обычной модели Фридрикса A_{11} (см. [8–10]).

На протяжении всей работы под обозначениями $\sigma(\cdot)$, $\sigma_{\text{ess}}(\cdot)$ и $\sigma_{\text{ac}}(\cdot)$ понимаются спектр, существенный спектр и абсолютно непрерывный спектр ограниченного самосопряженного оператора, соответственно.

Так как оператор K является компактным, а операторы A_{00}, A_{01}, A_{01}^* являются одномерными, из теоремы Вейля о существенном спектре следует, что существенный спектр $\sigma_{\text{ess}}(A)$ оператора A совпадает со спектром оператора A_{11}^0 . При этом $\sigma_{\text{ess}}(A)$ состоит из замыкания области значений $\text{Ran}(u)$ функции $u(\cdot)$, т. е.

$$\sigma_{\text{ess}}(A) = \sigma(A_{11}^0) = \overline{\text{Ran}(u)}.$$

Отметим, что существенный спектр оператора A может содержать множество с изолированной точкой $\{a\}$ такое, что $\text{mes}(u^{-1}(\{a\})) > 0$ ($\text{mes}(\cdot)$ означает лебегово мера). Следовательно, мы не сможем утверждать, что существенный спектр оператора A является абсолютно непрерывным. Например, если $d = 1, D = [0,2], D_1 = [0,1], D_2 = (1,2]$ и функция $u(\cdot)$ определена по формуле

$$u(x) = \begin{cases} x, & x \in D_1 \\ 2, & x \in D_2 \end{cases},$$

то $\sigma_{\text{ess}}(A) = [0,1] \cup \{2\}$. Так как $\text{mes}(u^{-1}(\{2\})) = 1$, то имеет место равенство $\sigma_{\text{ac}}(A) = [0,1]$.

Более того, если $u(\cdot)$ является кусочно абсолютно непрерывная функция на D и $\text{mes}(u^{-1}(\{a\})) = 0$ при всех $a \in \sigma_{\text{ess}}(A)$, то имеем $\sigma_{\text{ess}}(A) = \sigma_{\text{ac}}(A)$.

Далее, мы будем дополнительно предполагать, что оператор K является положительным. Положительный квадратный корень $K^{1/2}$ оператора K имеет вид

$$(K^{1/2}f)(p) = \int_D \tilde{K}(p,t)f(t)dt,$$

где через $\tilde{K}(\cdot, \cdot)$ формально обозначено ядро оператора $K^{1/2}$ и является квадратично-интегрируемой функцией на D^2 .

Пусть I_i — единичный оператор в $H_i, i = 0,1$ и $R_{11}^0(z) := (H_{11}^0 - zI_1)^{-1}$. В исследованиях дискретного спектра оператора A основную роль играет компактный (симметризованный) оператор $T(z), z \in C \setminus \sigma(A_{11}^0)$, действующий в H как 2×2 блочно-операторная матрица

$$T(z) := \begin{pmatrix} T_{00}(z) & T_{01}(z) \\ T_{10}(z) & T_{11}(z) \end{pmatrix}$$

где матричные элементы $T_{ij}(z) : H_j \rightarrow H_i, i, j = 0,1$ определяются по формулам

$$\begin{aligned} T_{00}(z) &:= (1+z)I_0 - A_{00} + A_{01}R_{11}^0(z)A_{01}^*, & T_{01}(z) &:= -A_{01}R_{11}^0(z)K^{1/2}, \\ T_{10}(z) &:= -K^{1/2}R_{11}^0(z)A_{01}^*, & T_{11}(z) &:= K^{1/2}R_{11}^0(z)K^{1/2}. \end{aligned}$$

Основным результатом данной заметки является следующая теорема.

Теорема 1. Пусть $(a,b) \subset R \setminus \sigma(A_{11}^0)$ и оператор-функция $T(z)$ при $z \rightarrow a+0$ и $z \rightarrow b-0$ сходится равномерно к некоторым операторам $T(a)$ и $T(b)$, соответственно. Тогда оператор A на интервале (a,b) может иметь лишь конечное число собственных значений.

Заметим, что в теореме 1 компактность оператора $T(b)$ является достаточным условием для конечности дискретного спектра оператора A на $(a,b) \subset R \setminus \sigma(A_{11}^0)$. Для обоснования этого факта рассмотрим следующий пример.

Пример. Пусть $d = 1$ и $D := [-1,1]$. Опишем свойства параметр-функций, входящих в (1) для этого случая: $v(\cdot)$ — вещественнозначная непрерывная функция на $[-1,1]$, а функции $u(\cdot)$ и $K(\cdot, \cdot)$ определяются равенствами $u(x) := x^2, K(x,y) := \varphi(x)\varphi(y)$, где $\varphi(\cdot)$ — вещественнозначная непрерывная функция на $[-1,1]$. Тогда $\sigma_{\text{ess}}(A) = [0,1]$ и оператор A имеет не более двух (не более одного) простых собственных значений, лежащих левее $z = 0$ (правее $z = 1$), см. [4]. Далее, найдя вид оператора $K^{1/2}$, после несложных вычислений получаем, что матричные элементы $T_{ij}(z) : H_j \rightarrow H_i, i, j = 0,1$ семейства операторов $T(z), z \in (-\infty, 0) \cup (1, \infty)$, имеют вид:

$$T_{00}(z)g_0 = \left(1 + z - w + \int_{-1}^1 \frac{v^2(t)dt}{t^2 - z}\right)g_0, \quad T_{01}(z)g_1 = -\frac{1}{\|\varphi\|} \int_{-1}^1 \frac{v(t)\varphi(t)dt}{t^2 - z} \int_{-1}^1 \varphi(t)f_1(t)dt,$$

$$T_{10}(z) = T_{01}^*(z), \quad (T_{11}(z)g_1)(x) = \left(\frac{1}{\|\varphi\|} \int_{-1}^1 \frac{\varphi^2(t)dt}{t^2 - z}\right)\varphi(x) \int_{-1}^1 \varphi(t)f_1(t)dt.$$

Ниже покажем, что равномерная сходимость семейства операторов $T(z)$, $z \in (-\infty, 0)$ при $z \rightarrow -0$ зависят от поведений функций $v(\cdot)$ и $\varphi(\cdot)$ в малой окрестности точки $x = 0$. Очевидно, что если $v(0) \neq 0$, то интеграл

$$\int_{-1}^1 \frac{v^2(t)dt}{t^2} \tag{2}$$

расходится. Поэтому при $v^2(0) + \varphi^2(0) \neq 0$, семейство операторов $T(z)$, $z \in (-\infty, 0)$ не сходится равномерно ни к какому оператору при $z \rightarrow -0$.

Пусть теперь $v(0) = \varphi(0) = 0$. Допустим, что существуют константы $C_1, C_2 > 0$ и $\delta > 0$ такие, что $C_1 |x| \leq v(x) \leq C_2 |x|$ и $C_1 |x| \leq \varphi(x) \leq C_2 |x|$ при $x \in (-\delta, \delta)$. Тогда интеграл (2) сходится. В этом случае семейство операторов $T(z)$, $z \in (-\infty, 0)$ сходится равномерно к оператору $T(0)$ при $z \rightarrow -0$. Аналогичные рассуждения верны при $z \rightarrow 1 + 0$.

Благодарность. Работа поддержана программой фонда Эйнштейна при международном математическом обществе. Автор приносит благодарность Берлинской математической школе и институту Вейерштрасса по прикладному анализу и стохастике за приглашение, поддержку и гостеприимство.

Литература:

1. A. K. Motovilov, W. Sandhas, Y. B. Belyaev. Perturbation of a lattice spectral band by a nearby resonance // J. Math. Phys., — 2001. — V. 42. — P. 2490–2506.
2. С. Н. Лакаев, Ш. М. Латипов. О существовании и аналитичности собственных значений двухканальной молекулярно-резонансной модели // Теор. и матем. физика, — 2011. — Т. 169. — №. 3. — с. 341–351.
3. M. I. Muminov, T. H. Rasulov. The Faddeev Equation and Essential Spectrum of a Hamiltonian in Fock Space // Methods Func. Anal. Topology, — 2011. — V. 17. — no. 1. — P. 47–57.
4. Т. Х. Расулов. Исследование существенного спектра одного матричного оператора // Теор. и матем. физика, — 2010, — Т. 164, — № 1, — с. 62–77.
5. Т. Х. Расулов. Уравнение Фаддеева и местоположение существенного спектра модельного оператора нескольких частиц // Известия вузов. Математика. — 2008, — № 12, с. 59–69.
6. R. P. Feynman. Statistical mechanics: a set of lectures (2nd ed.). Reading, Massachusetts: Addison-Wesley, 1998, p. 151.
7. М. Э. Муминов. О выражение числа собственных значений модели Фридрикса // Матем. заметки, — 2007, — Т. 82, — № 1, с. 75–83.
8. К. О. Friedrichs. Uber die Spectralzerlegung einee Integral operators // Math. Ann., — 1938, — V. 115, — no. 1, P. 249–272.
9. К. Фридрихс. Возмущение спектра операторов в гильбертовом пространстве. М., 1969.
10. К. О. Friedrichs. On the perturbation of continuous spectra // Comm. Pure Appl. Math., — 1948, — V. 1, — no. 4, — P. 361–406.

Организация приближённого решения уравнений состояния электрической цепи в MathCAD

Тиллабоев Ёдгор Кенжабоевич, кандидат физико-математических наук;
 Хакимов Равшан Мухамаджанович, ассистент;
 Холмирзаев Илхом Алоханович, ассистент
 Наманганский инженерно-педагогический институт (Узбекистан)

In the given article the possibilities of the elements' of count theories and MathCAD in nodal equations' solving of electrical circuit were analyzed.

Ключевые слова: электрические схемы, граф, MathCAD, матрица, СЛАУ.

Схемы замещения современных сложных электрических систем содержат десятки и даже сотни узлов и ветвей. Количество уравнений состояния для таких систем соответственно настолько велико, что для их решения необходимо использовать цифровые электронные вычислительные машины.

Более того, составление уравнений состояния для сложных схем является весьма трудоемкой процедурой, и решение данной задачи также целесообразно возложить на компьютер. Для этого требуется иметь формализованный подход к составлению уравнений, который был бы одинаков для схем любой сложности и конфигурации. Такой подход может быть разработан на основе аналитического представления конфигурации схемы замещения с помощью элементов теории графов и алгебры матриц.

Конфигурацию схемы замещения электрической системы можно отобразить в виде графа. Граф представляет собой множество вершин (узлов) и ребер (ветвей), соединяющих некоторые (а может быть и все) пары вершин. Если ребра графа имеют фиксированные направления, то этот граф называется направленным. Каждое ребро направленного графа имеет начальную и конечную вершину: его направление принимается от первой вершины ко второй. Схема замещения электрической системы обычно является связанным графом. Она состоит из ветвей (ребер), соединенных в узлы (вершины). Все величины, характеризующие состояние ветвей (токи, ЭДС, падения напряжения), имеют определенное направление (без чего не может быть рассчитан режим данной схемы). В связи с этим целесообразно каждой ветви схемы придать определенное, с произвольно выбранным, направление. Таким образом, схема замещения системы обычно является связанным направленным графом, ребрами которого служат ветви, а вершинами узлы. При изображении схем в виде графов нет надобности в специальных обозначениях сопротивлений и ЭДС. Ветви графически изображаются (прямой или кривой) с указанием их направлений. Таким образом, направление ветви от начального узла к конечному узлу одновременно является положительным направлением и для всех участвующих величин — ЭДС, тока и падения напряжения. Любая из этих величин может получиться положительной или отрицательной по отношению к принятому направлению.

В данной статье анализируем возможности элементов теории графа и MathCAD при решении узловых уравнений электрических схем.

Для иллюстрации вышесказанного рассмотрим следующую электрическую схему:

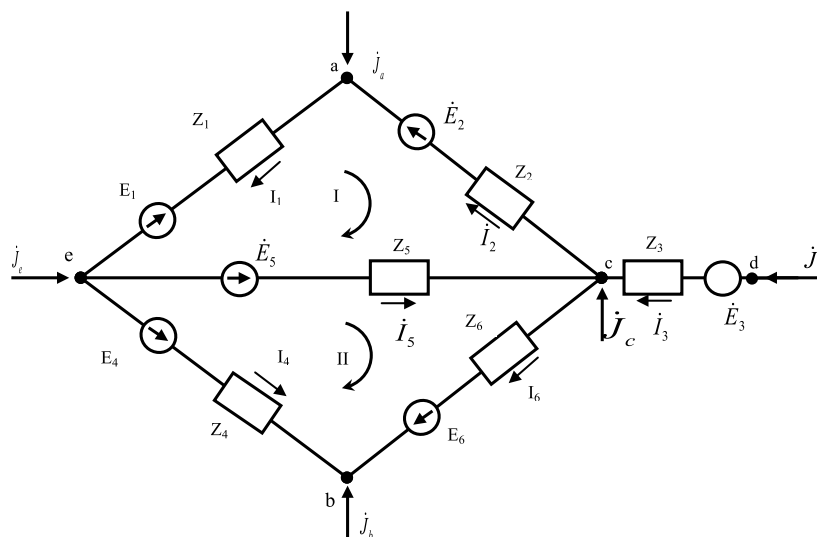


Рис. 1

На рис 2. данная схема показана в виде связанного направленного графа на которой выбраны направления ветвей, а также указаны номера ветвей и узлов.

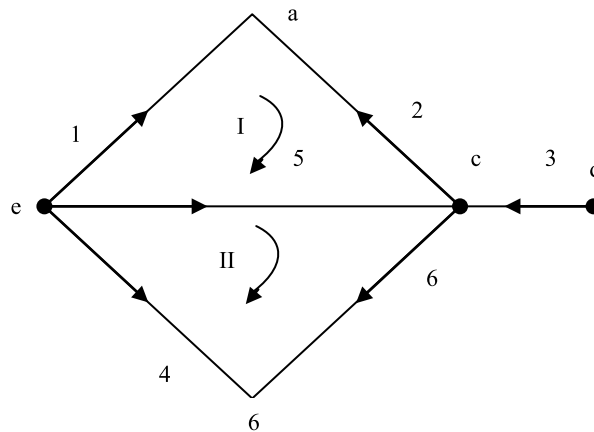


Рис. 2

Для направленного графа могут быть определены:

- 1) матрица соединений ветвей в узлах (первая матрица инциденций)
- 2) матрица соединений ветвей в независимые контуры (вторая матрица инциденций), служащие для обобщенного аналитического представления графа.

Матрица соединений ветвей в узлах — это прямоугольная матрица, число строк которой равно числу вершин графа n , а число столбцов — числу ребер m . Она обозначается следующим образом:

$$M_{\Sigma} = (m_{ij}); \quad i = 1, 2, \dots, n \quad j = 1, 2, \dots, m.$$

При этом номера строк i -соответствуют номерам вершин, а номера столбцов j -номерам ребер. Элементы матрицы M_{Σ} могут принимать одно из трех значений:

$m_{ij} = +1$, если узел \vec{z} — является начальной вершиной ветви j ;

$m_{ij} = -1$, если узел \vec{z} — является конечной вершиной ветви j ;

$m_{ij} = 0$, если узел \vec{z} — не является вершиной ветви j ;

Для направленного графа, показанного рис. 2, матрица M_{Σ} имеет вид:

$$M_{\Sigma} = \left[\begin{array}{cccccc} -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & +1 & -1 & 0 & -1 & +1 \\ 0 & 0 & +1 & 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & +1 & +1 & 0 \end{array} \right] \begin{array}{l} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{cccccc} \end{array}} \right\} \text{узлы}$$

$$\underbrace{\begin{array}{cccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{array}}_{\text{ветви}}$$

Выбрав узел e в качестве балансирующего, получим матрицу M из M_{Σ} путем исключения последней строки:

$$M = \left[\begin{array}{cccccc} -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & +1 & -1 & 0 & -1 & +1 \\ 0 & 0 & +1 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right]$$

Матрица соединений ветвей в независимые контуры это прямоугольная матрица, число строк которой равно числу независимых контуров графа k , а число столбцов числу ветвей m . Она обозначается следующим образом:

$$N = (n_{ij}), \quad i = \overline{1, k}, \quad j = \overline{1, m}.$$

При этом номера строк i соответствуют номерам независимых контуров, а номера столбцов j номерам ветвей. Элементы матрицы N определяются следующим образом:

$$n_{ij} = +1, \text{ если ветвь } j \text{ входит в контур } i \text{ и их направления совпадают;}$$

$$n_{ij} = -1, \text{ если ветвь } j \text{ входит в контур } i \text{ и их направления противоположны;}$$

$$n_{ij} = 0, \text{ если ветвь } j \text{ не входит в контур } i.$$

Для направленного графа, показанного на рис.2, матрица N имеет вид:

$$N = \left[\begin{array}{cccccc} +1 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & +1 & +1 \end{array} \right] \begin{array}{l} I \\ II \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} I \\ II \end{array}} \right\} \text{ независимые контуры}$$

$$\underbrace{\begin{array}{cccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{array}}_{\text{ветви}}$$

Матрица M и N дают возможность записать уравнения состояния электрической цепи в матричной форме. Система взаимно независимых уравнений первого закона Кирхгофа может быть представлена в виде

$$M \cdot I = J \tag{1}$$

где $I = (I_i), i = \overline{1, m}, J = (J_i), i = \overline{1, n-1}$ — столбцы токов в ветвях и задающих токов в узлах соответственно.

Аналогично система взаимно независимых уравнений второго закона Кирхгофа может быть записано в виде

$$N \cdot \dot{U}_B = 0 \tag{2}$$

где $\dot{U}_B = (\dot{U}_{Bi}), i = \overline{1, m}$ - столбец падений напряжений на ветвях схемы.

Система, состоящая из $(n-1)$ уравнений, связывающих напряжения узлов относительно балансирующего с задающими токами в узлах и ЭДС в ветвях, называется системой узловых уравнений. Оно широко применяется в практике расчетов установившихся режимов сложных электрических систем. Система узловых уравнений имеет следующий вид [2]:

$$Y_y \cdot \dot{U}_\Delta = \dot{J} - M \cdot Y_B \cdot \dot{E} \tag{3}$$

где $Y_B = Z_B^{-1} = \text{diag}(Y_i) = \text{diag}(1/Z_i), i = \overline{1, m}$

— матрица проводимостей ветвей, $Y_y = M \cdot Y_B \cdot M_t, M_t$ — транспонированная матрица M . При отсутствии ЭДС в ветвях, что характерно для большинства схем замещения реальных электрических систем, матричное узловое уравнение (3) имеет наиболее простой вид. Тогда при $\dot{E} = 0$ получаем

$$Y_y \cdot \dot{U}_\Delta = \dot{J} \tag{4}$$

видно, что формирование узловых уравнений вида (4) сводится к определению матрицы Y_y .

После определения матрицы Y_y задача сводится к решению систем алгебраических уравнений относительно к \dot{U}_Δ .

Методы решения СЛАУ можно разделить на две большие группы: прямые и итерационные.

В последние время появились многие пакетные программы, с помощью которых появилась возможность решения математических задач (в том числе и других задач науки, описывающее такими же математическими моделями) без составления компьютерных программ [1,2]. В учебном процессе (иногда и в научных учреждениях) с помощью использования таких систем как MathCAD, Maple, Matlab, Mathematika и.т.д занятия становятся интереснее, осмысление содержания занятия более быстрое и глубокое а также на укрепление излагаемых понятий и на решение задач остаётся достаточно много времени. Из выше указанных систем, MathCAD — более проще чем остальные и она предназначена для технических вузов, а остальные, можно сказать, для профессиональных математиков. Именно в MathCAD задача формулируется в наиболее естественном математическом виде, а в других математических системах шаги алгоритма решения задачи записываются с помощью команд системы.

Приведём алгоритм задачи:

- данная электрическая цепь преобразуется в виде графа;
- определяются матрицы M и N ;
- с помощью матрицы M определяются матрица Y_y ; (при этом определение M_i и операции над матрицами возможно при помощи Mathcad)
- система уравнения решается методом обратной матрица $\dot{U}_{\Delta} = Y_y^{-1} \cdot J$. (решения СЛАУ — при записи методом обратной матрицы проще, чем в остальных методах и требует меньше затрат времени)

При исходных данных [2]: (именно эти данные берутся, чтобы сопоставить результаты)

$$Y_e = 5; \quad e = 1,6; \quad J_a = J_1 = -0,6; \quad J_b = J_2 = 0,8; \quad J_c = J_3 = -0,6; \quad J_d = J_4 = 1,0$$

в окне MathCAD введём следующие команды и получаем результаты:

$$\begin{aligned} & y1 := 5 \quad y2 := 5 \quad y3 := 5 \quad y4 := 5 \quad y5 := 5 \quad y6 := 5 \quad j1 := -0,6 \quad j2 := -0,8 \\ & \quad j3 := -0,6 \quad j4 := 1 \\ & M := \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad M^T = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad YB := \begin{pmatrix} y1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & y2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & y3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & y4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & y5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & y6 \end{pmatrix} \\ & J := \begin{pmatrix} j1 \\ j2 \\ j3 \\ j4 \end{pmatrix} \quad U_{\Delta} := \begin{pmatrix} u1 \\ u2 \\ u3 \\ u4 \end{pmatrix} \quad M \cdot YB = \begin{pmatrix} -5 & -5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -5 & 0 & -5 \\ 0 & 5 & -5 & 0 & -5 & 5 \\ 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad Z := M \cdot YB \\ & \quad YY := Z \cdot M^T \\ & U_{\Delta} := YY^{-1} \cdot J \quad Z \cdot M^T = \begin{pmatrix} 10 & 0 & -5 & 0 \\ 0 & 10 & -5 & 0 \\ -5 & -5 & 20 & -5 \\ 0 & 0 & -5 & 5 \end{pmatrix} \quad U_{\Delta} = \begin{pmatrix} -0,075 \\ -0,095 \\ -0,03 \\ 0,17 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Полученные результаты совпадают с приведенными результатами [2].

В заключении можно сказать что, при вычислении электрических схем, таким путём, вручную не выполняются какие-то арифметические операции, не требуется применение законов, а только схема преобразуется в виде графа, определяются матрица M (видно, что это не имеет сложности) и с помощью выше указанного алгоритма решается узловое уравнение. Естественно, что при решение любой практической задачи невозможно без арифметических операций, но при этой работе особенно важный фактор является тот фактор, что без арифметических операций получаем результаты. Операции над матрицами и решения СЛАУ возложили на MathCAD.

Литература:

1. Тиллабоев, Ё. К, Дадамйрзаев М., Абдулхалифов Б. Об одном из методов решения уравнения Навье-Стокса. Молодой учёный. №6, (86), март 1, 2015 г. с. 7–11.
2. В. А. Веников и др. Математические задачи электроэнергетики. М., Высшая школа, 1987 г.
3. Охарзин., В. А. Прикладная математика в системе Mat CAD. СПб, Лань, 2008 г. — 352 с.

ФИЗИКА

Рентгеновские спектры многозарядных ионов в высокотемпературной лазерной плазме

Зайнабидинов Сирожиддин Зайнабидинович, доктор физико-математических наук, профессор;

Маткаримова Нилуфар Бахтияровна, магистрант;

Мадаминов Хуршиджон Мухамедович, кандидат физико-математических наук, доцент;

Эрматов Шукрулла Абдулфайзиевич, кандидат физико-математических наук, доцент

Андижанский государственный университет (Узбекистан)

Настоящая работа посвящается анализу результатов исследований рентгеновских спектров многозарядных ионов в высокотемпературной плазме. В ходе выполненной работы было зарегистрировано и идентифицировано свыше четырехсот спектральных линий многозарядных ионов цинка, фтора, меди, магния, алюминия и никеля в рентгеновском диапазоне. Эти результаты являются важными при создании рентгеновских лазеров, дают обширную возможность исследование физических процессов в высокотемпературной плазме.

Ключевые слова: многозарядный ион, высокотемпературная плазма, спектральная линия, рентгеновский диапазон, рентгеновский лазер.

In the present paper has been analyzed the results of research the spectra of multiply charged ions in a high-temperature plasma. During the work has been registered and identified more than four spectral lines of multiply charged ions of zinc, fluoride, copper, magnesium, aluminum and nickel in the X-ray range. These results are important in creating X-ray lasers, provide ample opportunity to study physical processes in the high-temperature plasma.

Key words: multiply charged ion, high-temperature plasma, spectral line, X-ray range, X-ray laser

Введение. Потребность интерпретации спектроскопических характеристик атомов, находящихся в особых условиях, возник в основном по двум причинам. Во-первых, в экспериментах по исследованию возможности создания рентгеновских лазеров не обойтись без знания структуры электронных оболочек атомов. Кроме этого, изучения спектроскопических констант атомов, которые широко используется в различных направлениях науки и техники, является одним из важных направлений фундаментальной физики. Во-вторых, проведенные исследования в направлении управляемого термоядерного синтеза показали, что одним из наиболее точных, порой единственным методом диагностики высокотемпературной плазмы является рентгеноспектральная диагностика по интенсивностям спектральных линий многозарядных атомов. Такие характеристики излучений в инфракрасном, видимом и ультрафиолетовом диапазонах, очевидно, недостаточны для понимания физических процессов, протекающих в высокотемпературной плазме.

Тем не менее, к настоящему времени подробно исследовались лишь К-спектры многозарядных ионов.

Но L- и M-спектры многих электронов изучены пока гораздо хуже. Полностью отсутствуют спектроскопические данные для нескольких изоэлектронных последовательностей ряда элементов. Все вышесказанное делает важным изучение L- и M-спектров в диапазоне длин волн $\lambda = 5 \div 20$. Сложность идентификации, связанная с большой плотностью спектральных линий в этом диапазоне, обязывает применять горячие источники с малыми размерами и светосильной регистрирующей аппаратурой.

Рентгеновские спектры излучения многозарядных ионов цинка. Были измерены длины волн и выполнена идентификация L-спектров многозарядных ионов цинка, полученных ранее в лазерной плазме [1]. Результаты этих измерений приведена денситограмма спектра излучения ионов цинка в окрестности резонансных линий 3С, 3D и 3Е неоноподобного иона ZnXXI (рис. 1). Как показывают расчеты [5], соответствующие им спутанные переходы типа 2р — 3d в целом существенно интенсивнее, чем спутанные линии 3А, 3В и 3F, 3G неоноподобного иона.

Как видно из рис. 1, наиболее интенсивные линии 3С ($\lambda = 1.0459 \text{ м}$) и 3D ($\lambda = 1.0664 \text{ м}$) имеют растя-

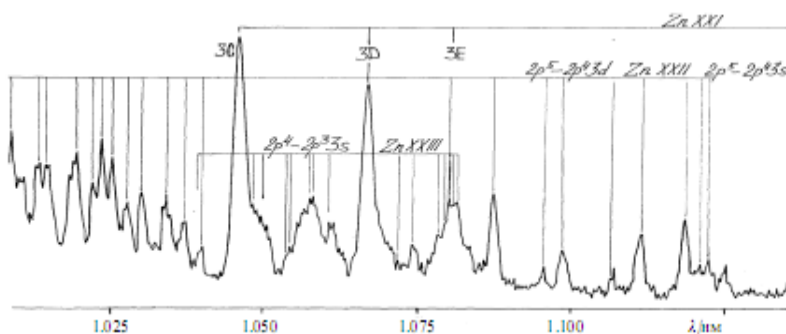


Рис. 1. Денситограмма спектра излучения ионов цинка ZnXXI

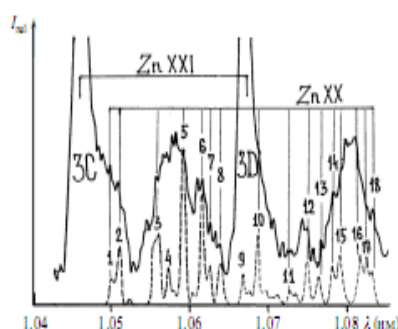


Рис. 2. Модельный спектр излучения (обозначен пунктиром) Na-подобного иона ZnXX и ZnXXI

нутые длинноволновые крылья, образованные, по-видимому, спектрально неразрешающимися ди-электронными сателлитами с более высокими ($n \geq 4$) дважды возбужденных уровней $2ln'l'n'$ ($2l$ означает дырку в оболочке с $n=2$) натриеподобного иона. Подавляющее число изолированных линий рис. 1 надежно идентифицируется с переходами в кислородоподобном ионе ZnXXIII и фтороподобном ионе ZnXXII. Анализ рис. 1 показывает, что в рассматриваемом диапазоне длин волн имеет место именно такой сложный случай накладывающихся друг на друга линий, обусловленных переходами в различных ионах (в основном от натриеподобных до кислородоподобных).

На рис. 2 представлен модельный спектр излучения (обозначен пунктиром) Na-подобного иона ZnXX, соответствующий корональному распределению интенсивностей при температуре электронов 400 эВ. Составленный модель учитывает заселение автоионизационных уровней только за счет диэлектронного захвата, поскольку прямое возбуждение электронным ударом уровней $1s^22s^22p^63l$ для сравнительно легких ионов цинка имеет существенное значение лишь в сильно недоионизованной плазме. Рис. 2 позволяет провести сопоставление модельного и экспериментального спектров, результат сопоставления представлен в таблице 1.

Несмотря на то, что точность совпадения длин волн предполагаемых пар модельного и экспериментального спектров в основном соответствует точности эксперимента, интенсивности линий не вполне описываются рас-

считанным спектром; особенно это касается чрезмерно интенсивной линии 1.059 нм теоретического спектра. Ее интенсивность складывается из интенсивностей по крайней мере трех линий с теоретическими длинами волн 1.05886, 1.05888 и 1.05907 нм; возможно, расчеты дают слишком близкие длины волн и в действительности эта спектральная группа не столь компактна — ее интенсивность более «размазана» по оси длин волн.

Рентгеновские спектры ионов FVIII и FIX. Типичная спектрограмма содержащая спектральные линии H- и He-подобных ионов FIX, VIII, приведена на рис. 3.

Из рис. 3 видно, что на расстояниях $r > 1$ мм от мишени линии становятся очень узкими, их ширина $\Delta\lambda$ не превосходит 2 пм. Оценки, выполненные для различных механизмов уширения, показывают, что наблюдаемая ширина не связана с характеристиками источника спектров, а является аппаратной, т. е. определяется шириной кривой отражения используемого кристалла CsAP [6]. Поскольку положение центра линии можно измерить с погрешностью $\sim 0.1 \Delta\lambda$, то предельно достижимая для данного спектрографа погрешность относительных измерений длин волн $\Delta\lambda_{lim} \approx 0.2$ нм. Для реализации такой же точности абсолютных измерений необходимо иметь достаточно большое число узких реперных линий, длины волн которых известны с погрешностью, значительно меньшей, чем $\Delta\lambda$. Такими реперами могут быть спектральные линии, обусловленные переходами $np \rightarrow 1s$ в H- и He-подобных ионах. При этом существенно, что эти областями плазмы,

Таблица 1

Номер на рис. 2.	$\lambda_{теор}, nm$	λ_{exp}, nm	$\lambda_{теор} - \lambda_{exp}, pm$	Номер на рис. 2.	$\lambda_{теор}, nm$	λ_{exp}, nm	$\lambda_{теор} - \lambda_{exp}, pm$
3С	1.0457	1.0459	-0.2	10	1.0687	1.0684	0.3
1	1.0502	1.0501	0.1	11	1.0727	1.0726	0.1
2	1.0508	1.0507	0.1	12	1.0748	1.0748	0
3	1.0555	1.0556	-0.1	13	1.0763	1.07637	-0.4
4	1.0572	1.0570	0.2	14	1.0781	1.0781	0
5	1.0590	1.0590	0	15	1.0790	1.0792	-0.2
6	1.0614	1.0613	0.1	16	1.0810	1.0811	-0.1
7	1.0624	1.0622	0.2	17	1.0824	1.0825	-0.1
8	1.0639	1.0636	0.3	18	1.0831	1.0831	0
3D	1.0667	1.0664	0.3				

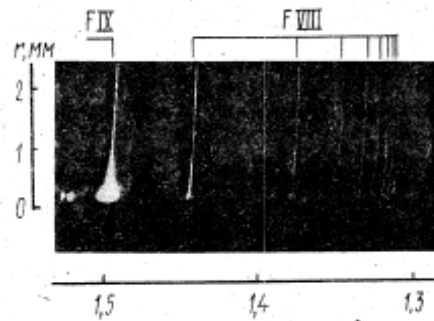


Рис. 3. Спектры излучения лазерной плазмы фторопластовой мишени, зарегистрированные спектрографом с кристаллом CsAP

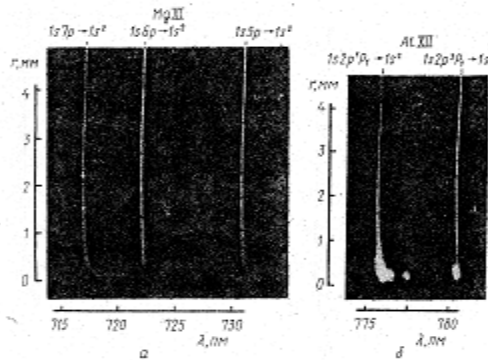


Рис. 2. Спектры излучения лазерной плазмы магниевой (а) и алюминиевой (б) мишеней, зарегистрированные спектрографом с кристаллом кварца

что и измеряемые, так что возможный доплеровский сдвиг, связанный с разлетом плазменного факела, не приведет к увеличению погрешности абсолютных измерений.

В качестве реперов (в таблице отмечены звездочками) использовались линии $1snp \rightarrow 1s^2$ He-подобного иона F VIII, теоретические значения длин волн которых, известные с погрешностью не хуже $\Delta\lambda / \lambda \approx 10^{-5}$, были взяты из [7]. По реперным линиям строилась дисперсионная кривая спектрографа, для чего полиномом второго порядка по методу наименьших квадратов апрокси-

мировалось отклонение реальной дисперсионной кривой от идеальной, соответствующей схеме Иоганна. Из таблицы 2 видно, что отличие измеренных значений длин волн ионе F VIII от теоретических, во-первых, не превышает 0.25 пм и, во-вторых, уменьшается при увеличении r (линии становятся уже). Для $r < 2$ мм, например, расхождение экспериментальных и теоретических значений уже не превышает 0.1 пм, что дает относительную погрешность измерений $\Delta\lambda / \lambda \approx (6-8) \cdot 10^{-5}$. Примерно такую же точность следует ожидать и для результатов из-

Таблица 2. Результаты измерений длин волн спектральных линий ионов FVIII, IX, излучаемых областями разлетающейся лазерной плазмы, расположенными r от поверхности мишени; реперные линии отмечены звездочкой

Переход	$\lambda_{теор}, nm$	λ_{exp}, nm			
		0.1	1.0	2.0	2.5
* $1s2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	1694.99	1695.0	1695.0	1695.0	1695.0
$2p^2\ ^1D_2 \rightarrow 1s2p\ ^1P_1$	1528.5	1529.0	1529.1	1529.3	—
$2p^2\ ^3P_2 \rightarrow 1s2s\ ^3S_1$	1521.9	1521.6	1521.5	1521.4	—
$2p^2\ ^1P_1 \rightarrow 1s2s\ ^1S_0$	1515.7	1515.8	1515.9	1516.0	-1498.1
$2p\ ^2P_{3/2, 1/2} \rightarrow 1s\ ^2S_{1/2}$	1498.2	1498.3	1498.4	1498.1	1445.8
* $1s3p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	1445.80	1445.8	1445.8	1445.8	1378.2
$1s4p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	1378.15	1378.4	1378.3	1378.2	1349.0
$1s5p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	1348.90	1348.9	1348.8	1349.0	1333.4
$1s6p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	1333.51	1333.5	1333.2	1333.4	—
* $1s7p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	1324.39	1324.5	1324.4	1324.4	—
* $1s8p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	1318.54	1318.3	1318.6	1318.5	—

мерения длин волн спутников резонансной линии иона F IX, также приведенных в таблице 2.

В качестве примера на рис. 4 приведены спектры плазмы Mg и Al, зарегистрированные с помощью кристалла кварца ориентации [1010] ($2d = 851.2$ нм), установленного в схеме Иоганна при диаметре круга Роуанда 50 см. В отличие от описанных выше экспериментов, в данном случае для получения пространственного разрешения в направлении разлета плазмы кристалл был изогнут в виде сферы радиусом $R = 50$ см. Следует, однако, отметить, что такая точность может быть достигнута лишь для линий, эффективно излучаемых далекими от мишени областями плазмы (например, для линий, хорошо возбуждаемых в процессе рекомбинации), а для линий, излучаемых лишь примышенной областью, погрешность измерений будет несколько выше.

L-спектры многозарядных ионов Ni и Cu, образующихся в плазме X-пинча. Для измерения длин волн L-спектров многозарядных ионов предложено использовать разлетающуюся рекомбинирующую плазму, образующуюся при взрыве металлических проволочек в процессе разряда в сильноточном диоде. Так, на [3] приведен ти-

пичный пример спектрограммы, полученной при взрыве проволочки алюминия (диаметр 35 мкм) в конфигурации X-пинча с помощью спектрографа со сферически изогнутым кристаллом слюды. На спектрограммах и денситограммах, приведенных на рис. 1 [3], хорошо различаются переходы типа $n = 1 \rightarrow n' = 12$ для Ne-подобных ионов Al XII. Видно, что очень широкие в центре (в перекрестии проволочек) спектральные линии в процессе разлета ионов из перекрестья (из «горячей точки») сильно сужаются. На расстоянии нескольких миллиметров от центра они становятся очень узкими, но при этом все еще достаточно интенсивными, что очень важно для измерений и идентификации их длин волн, высоких точностях.

Фотографии спектрограмм никеля и меди, полученных в нашем эксперименте, приведены на рис. 5, 6. Там же показаны денситограммы этих спектров. На них хорошо различаются яркие линии Ne-подобных ионов, длины волн которых были ранее с хорошей точностью измерены в экспериментах с лазерной плазмой [2], поэтому при обработке спектрограмм мы использовали их в качестве реперов.

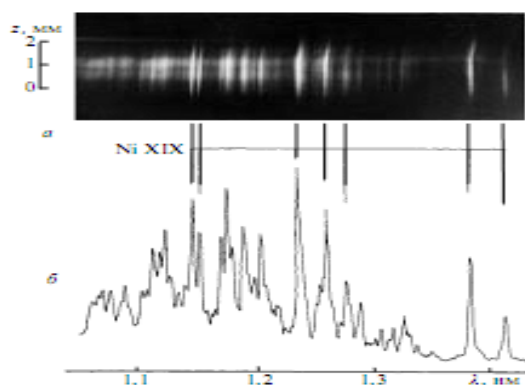


Рис. 5. Спектрограмма (а) и денситограмма (б) спектров многозарядных ионов Ni в плазме X-пинча

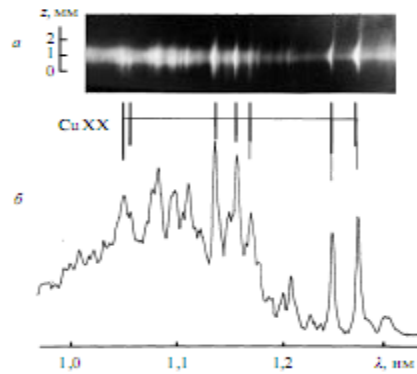


Рис. 6. Спектрограмма (а) и денситограмма (б) спектров многозарядных ионов Cu в плазме X-пинча

На спектрограммах отчетливо проявляется отмеченная выше особенность X-пинчевых спектрограмм — сильное сужение линий на периферии спектра, что позволило определить относительные координаты линий с максимальной точностью никеля и меди.

Особенно это касается линий, принадлежащих сателлитным линиям Na-подобных ионов. Для их окончательной идентификации требуется детальный кинетический анализ заселения и распада уровней различных ионов с привлечением экспериментальных интенсивностей спектральных линий.

Заключение. В настоящей работе приведены результаты систематических исследований спектров многозарядных ионов в высокотемпературной плазме, включающее в себя развитие методов возбуждения и регистрации спектров ионов различной кратности с потенциалами ионизации $E_i > 1$ кэВ. При выполнении данной работы было зарегистрировано и идентифицировано свыше четырехсот спектральных линий многозарядных ионов цинка, фтора, меди и никеля в рентгеновском диапазоне. Эти результаты являются важными для таких направлений, как: возможность создания рентгеновских лазеров, исследование физических процессов в высокотемпературной плазме.

Литература:

1. V.A. Boiko, S.A. Pikuz, A.Ya. Faenov. *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer.*, 19, 11 (1978).
2. В. А. Бойко, В. Г. Пальчиков, И. Ю. Скобелев, А. Я. Фаенов. Рентгеновская спектроскопия многозарядных ионов. — М.: Энергоатомиздат, 1988.
3. Х. М. Мадаминов, С. З. Зайнабидинов, Н. Маткаримова, Ш. А. Эрматов, Ж. Каххоров. Изучения внутренней электронной структуры атомов твердых тел, с помощью лазеров. Материалы Республиканской научно-технической конференции «Физика конденсированных сред и актуальные задачи материаловедения», Фергана, 2014 г., стр. 38–39.
4. W.C. Martin. *Phys. Scripta*, 24, 725 (1981).
5. J. Isen *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 41, 131 (1989).
6. В. А. Бойко, Б. А. Брюнеткин, А. Б. Гильварг и др. *ПТЭ*, 6, 179 (1983).
7. В. А. Бойко, В. Г. Пальчиков, И. Ю. Скобелев, А. Я. Фаенов. Спектроскопические константы атомов и ионов. — М.: Изд-во стандартов, 1988.

Пути повышения эффективности солнечных элементов

Зайнабидинов Сирожиiddин Зайнабидинович, доктор физико-математических наук, профессор;
Андижанский государственный университет (Узбекистан)

Саидов Амин Сафарбоевич, доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник;
Усмонов Шукрулла Нейматович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник
Физико-технический институт НПО «Физика-Солнца» АНРУз (Узбекистан)

Мадаминов Хуршидjon Мухамедович, кандидат физико-математических наук, доцент;
Курбанов Азизжон Обитжонович, кандидат физико-математических наук, доцент;
Маткаримова Нилуфар Бахтияровна, магистрант
Андижанский государственный университет (Узбекистан)

В данной работе приведены результаты исследований спектральных зависимостей фототока $pSi-nSi_{1-x}Sn_x$ ($0 \leq x \leq 0.04$) — структур, полученные на основе эпитаксиальных пленок твердого раствора $Si_{1-x}Sn_x$ выращенные методом жидкофазной эпитаксии, в широком спектральном диапазоне энергии фотонов. Полученные данные позволили определить ширину запрещенную зону данного твердого раствора, значение которого составляло ~ 1.06 эВ. Было определено, что атомы олова (Sn) в запрещенной зоне твердого раствора $Si_{1-x}Sn_x$ образуют энергетический уровень $E_c \approx 0.04-0.07$ эВ. Этот факт представляет большой интерес при создании солнечных элементов на основе данного твердого раствора, охватывающий инфракрасной области спектра излучения.

Ключевые слова: *твердый раствор, спектральные зависимости, жидкофазная эпитаксия, солнечный элемент, инфракрасная область*

This article presents the results of studies of the spectral dependence of the photocurrent $pSi-nSi_{1-x}Sn_x$ ($0 \leq x \leq 0.04$) — structures derived from epitaxial films of $Si_{1-x}Sn_x$ grown by liquid phase epitaxy, in a wide spectral range of photon energy. The data obtained allowed to determine the width of the band gap of the solid solution, the value of which is ~ 1.06 eV. It was determined that the tin atoms (Sn) in the band gap of the solid solution form $Si_{1-x}Sn_x$ energy level $E_c \approx 0.04-0.07$ eV. This fact is of great interest in the creation of solar cells on the basis of a solid solution bows infrared radiation spectrum.

Key words: *the solid solution, spectral dependence, liquid phase epitaxy, solar cells, infrared radiation spectrum.*

Как известно, примерно 44 % фотонов солнечного излучения лежат в инфракрасной (ИК) области спектра излучения. Учитывая, что в настоящее время основным материалом для солнечных элементов (СЭ), является кремний, представляет большой интерес создание в запрещенной зоне кремния примесной зоны, позволяющей осуществить двойной электронный переход из валентной зоны в зону проводимости с поглощением фотонов с энергией $h\nu < E_{g, Si}$. Исследования разработки технологий эффективных СЭ с использованием ИК спектра излучения Солнца на основе примесного фотовольтаического эффекта (ПФВЭ) является актуальным и до настоящего времени остается нерешенным [1].

Одним из основных трудностей при решении этой проблемы является, требования, предъявляемые к состоянию примесных атомов в кристаллической решетке матрицы базового полупроводника [2–5]. Введение примесей с высокой растворимостью ($5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) и энергетическими уровнями в запрещенной зоне базового полупроводника с фиксированной энергией ионизации $E \leq E_g/2$ требует особых технологических приемов. Одновременно, с этим примесные атомы должны не искажать кристаллическую решетку базового полупроводника [4].

Вышеперечисленным требованиям отвечает лишь небольшое число примесей, в котором так же входят изовалентные примеси. Изовалентные примеси, энергетические уровни которых лежат в запрещенной зоне базового полупроводника, называются запрещено-зонными изовалентными примесями (ЗЗИП) [5]. ЗЗИП могут быть атомы или молекулы полупроводниковых материалов, запрещенные зоны (E_{gi}) у которых меньше, чем запрещенной зоны (E_g) базового полупроводника $E_{gi} < E_g$.

В этом плане для исследования ПФВЭ весьма интересно использовать ЗЗИП атомов олова (Sn), растворимость которых не менее $2 \cdot 10^{18} - 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ [6] и создающий энергетический уровень в запрещенной зоне с энергией ионизации $E \leq 0.25$ эВ в Si [7].

Si и Sn изовалентны и сумма ковалентных радиусов атомов Si₂ и молекул соединения Si-Sn близки $r_{Si} + r_{Si} = 2.34 \text{ \AA}$ и $r_{Si} + r_{Sn} = 2.57 \text{ \AA}$, соответственно. Эти компоненты удовлетворяют условию образования твердого раствора замещения, представленное в работе [8];

$$\left| (r_{Si} + r_{Si}) - (r_{Si} + r_{Sn}) \right| = 0.23 \text{ \AA} < 0.1 \cdot (r_{Si} + r_{Si}), \quad (1)$$

где z_{Si} , z_{Sn} , r_{Si} и r_{Sn} валентности и ковалентные радиусы атомов кремния и олова, соответственно. Следовательно, взаимное замещение молекул этих компонентов не сильно деформирует кристаллическую решетку.

Для установления влияния изовалентной примеси Sn на фотовольтаический эффект (ФВЭ) были исследованы спектральные зависимости фототока $pSi-nSi_{1-x}Sn_x$ ($0 \leq x \leq 0.04$) — структур в широком спектральном диапазоне энергий фотонов (E_{ph}). С этой целью, также были исследованы контрольные образцы — стандартные $pSi-nSi$ -структуры, без примеси Sn.

При исследовании к структурам создавались токосъемные омические контакты, методом вакуумного напыления серебра — сплошные с тыльной стороны и полосатые из серебра со стороны эпитаксиального слоя твердого раствора (TP) (см. рис. 1). Спектральные зависимости фототока исследовались на установке с призмным монохроматором фирмы CARL ZEISS JENA (Германия). Источником светового излучения служила галогеновая лампа накаливания мощностью 100 Вт.

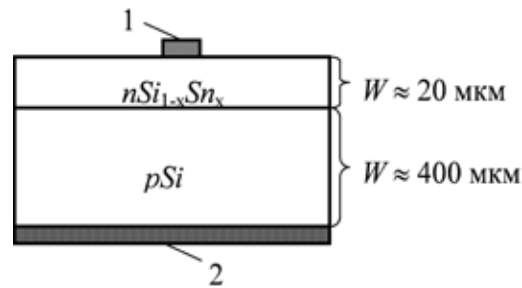


Рис. 1. Схема $pSi-nSi_{1-x}Sn_x$ ($0 \leq x \leq 0.04$) — структуры: 1, 2 — омические контакты

Из экспериментальной зависимости спектра фототока, приведенной на рис. 2 видно, что край изменения фототока $pSi-nSi_{1-x}Sn_x$ ($0 \leq x \leq 0.04$) — структуры (кривая 1, рис. 2) сдвинут в длинноволновую сторону по сравнению с контрольной структурой (кривая 2, рис. 2). Сдвиг фототока $pSi-nSi_{1-x}Sn_x$ — структуры в длинноволновую сторону обусловлен шириной запрещенной зоны твердого раствора. На основе сдвига фототока $pSi-nSi_{1-x}Sn_x$ ($0 \leq x \leq 0.04$) — структуры в длинноволновую сторону спектра излучения по сравнению с кремниевой структурой мы оценили ширину запрещенной зоны твердого раствора, которая составляла $E_{g, SiSn} = 1.06 \text{ эВ}$.

Спад фототока $pSi-nSi_{1-x}Sn_x$ ($0 \leq x \leq 0.04$) — структуры в коротковолновой области спектра излучения обусловлен глубиной залегания разделяющего p-n-перехода, в нашем случае она составляет 20 мкм. Когда длина диффузии неосновных носителей меньше, чем глубину залегания p-n-перехода, то электронно-дырочные пары, генерированные высокоэнергичными фотонами, в приповерхностной области структуры не доходят до разделяющего барьера и не участвуют в создании фототока, что приводит к спаду фоточувствительности структуры. Спад фототока $pSi-nSi_{1-x}Sn_x$ ($0 \leq x \leq 0.04$) — структуры в коротковолновой области спектра с энергией фотонов $E_p > 1.6 \text{ эВ}$ сильнее, чем контрольных $pSi-nSi$ — структур. Это, обусловлено тем, что длина диффузии неосновных носителей в твердом растворе $nSi_{1-x}Sn_x$ ($0 \leq x \leq 0.04$) меньше, чем в nSi материале.

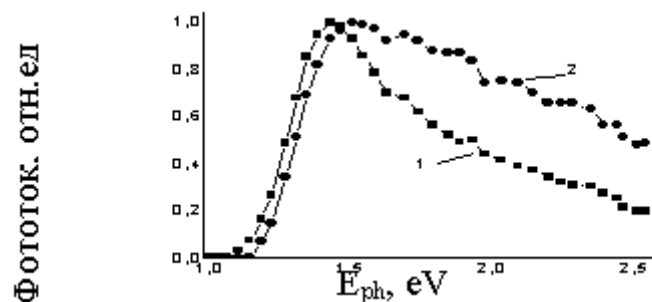


Рис. 2. Спектральные зависимости фототока $pSi-nSi_{1-x}Sn_x$ ($0 \leq x \leq 0.04$) — структур: 1 — $pSi-nSi_{1-x}Sn_x$ ($0 \leq x \leq 0.04$); 2 — $pSi-nSi$

Известно, что генерационно-рекомбинационные процессы носителей в полупроводниках связаны не только положением энергетических уровней примесей, но и с их концентрацией, которая в свою очередь сильно зависит от температуры.

Для проверки вышесказанного были исследованы температурные зависимости фототока $pSi-nSi_{1-x}Sn_x$ ($0 \leq x \leq 0.04$) — структур в широком спектральном диапазоне энергии фотонов. На рис. 3 показаны зависимости относительного прироста фототока, определяемые как отношение значений фототока при различных температурах ($J_{ph}(T)$) к его значению при комнатной температуре ($J_{ph}(300\text{ K})$) от энергии фотонов, падающих на образец.

Из рис. 3 видно, что когда энергия фотонов $E_{ph} > E_{g, SiSn}$, в собственной области поглощения, фототок практически не зависит от температуры. Когда $E_{ph} < E_{g, SiSn}$, в примесной области поглощения фототок сильно зависит от температуры. С ростом температуры наблюдается монотонный рост фототока в примесной области поглощения, причем максимальный прирост фототока наблюдается при $E_{ph} \approx 1.01$ эВ. При достижении температуры $T = 363$ К максимальный относительный прирост фототока составляет $J_{ph}(T)/J_{ph}(300\text{ K}) = 4.3$, что является существенным и свидетельствует о возникновении примесного теплофотовольтаического эффекта в исследуемых образцах с участием уровня Sn.

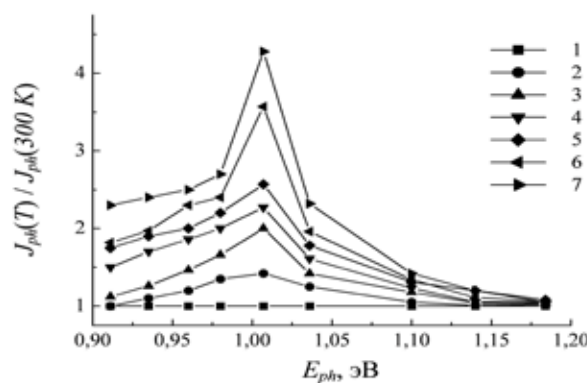


Рис. 3. Спектральные зависимости относительного прироста фототока $J_{ph}(T)/J_{ph}(300\text{ K})$ $pSi - nSi_{1-x}Sn_x$ ($0 \leq x \leq 0.04$) — структур при различных значениях температур: 1–293 К; 2–313 К; 3–323 К; 4–333 К; 5–343 К; 6–353 К; 7–363 К

Повышение прироста фототока с ростом температуры в примесной области поглощения, по-видимому, обусловлено возрастанием скорости тепловой генерацией неравновесных электронов Δn_i из уровня олова за счет увеличения тепловой генерации электронов с примесного уровня, способствует электронным переходам из валентной зоны на примесный уровень, которые происходят под воздействием фотонов с энергией $E_{ph} \geq E_{g, SiSn}$. В результате таких электронных переходов в валентной зоне генерируются неравновесные дырки. Поскольку максимальный прирост фототока наблюдается при значениях $E_{ph} \approx 1.01$ эВ, близких ширине запрещенной зоны полученного твердого раствора $Si_{1-x}Sn_x$, а примесный уровень олова может быть расположен ближе к дну зоны проводимости твердого раствора.

Для невырожденных полупроводников уровень Ферми всегда находится в запрещенной зоне и для расчета концентрации электронов, находящихся в зоне проводимости, можно воспользоваться распределением Максвелла-Больцмана:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} N(E) f(E, T) dE = \int_{E_c}^{\infty} N(E) e^{-\frac{E-E_F}{kT}} dE = N_c e^{-\frac{E_c-E_F}{kT}} \quad (2)$$

где N_c — эффективная плотность состояний в зоне проводимости:

$$N_c = 2 \cdot \left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2} = 2,5 \cdot 10^{19} \cdot \left(\frac{m_n^*}{m} \right)^{3/2} \cdot \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2} = 2,8 \cdot 10^{19} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2}, \quad (3)$$

где m_n^* — эффективная масса электрона в зоне проводимости — $m_n^* = 0.33m$.

Зная n , мы можем определить положение уровня Ферми в твердом растворе $nSi_{1-x}Sn_x$ ($0 \leq x \leq 0.04$):

$$E_c - E_F = kT \ln \left(\frac{N_c}{n} \right) \approx 0.1465 \text{ эВ} \quad (4)$$

Таким образом, исследования спектральной зависимости фототока и оценка уровня Ферми образцов при различных температурах позволили предположить, что положение энергетического уровня Sn находится в интервале $E_c \approx 0.04 - 0.07$ эВ в запрещенной зоне TP $Si_{1-x}Sn_x$.

В кремниевых структурах с изовалентными запрещено-зонными примесями Sn совместное влияние температуры и освещения способствует тепло — и фотогенерации неравновесных электронно-дырочных пар в примесной области поглощения и расширяет спектральную область чувствительности в длинноволновую сторону. Этот факт даст нам получить солнечный элемент на основе твердых растворов $Si_{1-x}Sn_x$, охватывающий ИК область спектрального диапазона.

Литература:

1. Бахадырханов, М.К., Илиев Х.М., Тачилин С.А., Насридинов С.С., Абдурахманов Б.А. Примесный фотоэлектрический эффект в кремнии с многозарядными кластерами марганца // Гелиотехника. — Ташкент, 2008. №2. — с. 88–92.
2. Luque, A. Marti. Increasing the Efficiency of Ideal Solar Cells by Photon Induced Transitions at Intermediate Levels // Phys. Rev. Lett., 1997. — V. 78. №26. -P. 5014–5017.
3. Beaucame, G., Brown A. S., Keevers M. J., Corkish R., Green M. A. The impurity photovoltaic (IPV) effect in wide-bandgap semiconductors: an opportunity for very-high-efficiency solar cells? // Prog. Photovolt. Res. Appl., 2002. — V. 10. — P. 345–353., Saidov M. S. Valence band Impurity Photovoltaic Effect // Гелиотехника. — Ташкент, 2002. №1. — с. 3–6.
4. Саидов, М.С. Электроактивность изовалентных примесей и фотовольтаический эффект // Гелиотехника. — Ташкент, 2005. №3. — с. 67–72.
5. Trumbore, F. A., Isenberg C. R. and Porbansky E. M. On the temperature-dependence of the distribution coefficient: The solid solubilities of tin in silicon and germanium // J. Phys. Chem. Solids. — 1959. — V. 9. — P. 60.
6. Бахадирханов, М.К., Ортиков И.Б. Малый энциклопедический справочник по полупроводниковым материалам. — Ташкент, 2006. — 199 с.
7. Саидов, М.С. Твердые растворы кремния и возможности их использования для каскадных солнечных элементов // Гелиотехника. — Ташкент, 1997. №5–6. — с. 57–67.

Исследование фотолюминесценции коллоидных квантовых точек на основе халькогенидов металлов

Степанов Евгений Михайлович, студент

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» имени В. И. Ульянова (Ленина)

Коллоидные квантовые точки (ККТ) — полупроводниковые кристаллы нанометрового размера, выращенные в растворе и покрытые слоем стабилизатора, который препятствует их дальнейшей агрегации [1]. Квантовые точки (КТ) являются квантово-размерными структурами, поэтому их свойства определяются в первую очередь размером. Меняя размер КТ можно управлять положением энергетических уровней в материале и, следовательно, эффективной шириной запрещенной зоны. При уменьшении геометрического размера КТ эффективная ширина запрещенной зоны увеличивается, следовательно, длина волны излучения сдвигается в коротковолновую область спектра. Типичные спектры фотолюминесценции КТ имеют малую, но конечную полупрозрачность порядка десятков нанометров. Уширение спектров фотолюминесценции вызвано дисперсией частиц по размерам. Широкий спектр поглощения КТ позволяет использовать один источник возбуждения для нескольких

образцов с разным размером частиц. Дополнительные преимущества могут быть получены при нанесении ККТ на пористые матрицы [2], поскольку это расширяет возможности управления формой спектра. Также стоит отметить, что при нанесении ККТ на подложку имеют место механизмы самоорганизации [3,4], которые в перспективе позволят создавать материалы с заданными оптическими и иными свойствами [5]. Таким образом, у ККТ есть ряд преимуществ выгодно отличающих их от других квантово-размерных структур подобного рода. Поскольку технология синтеза ККТ на сегодняшний день имеет некоторые недостатки, дальнейшее исследование в этой области является целесообразным.

Образцы и оборудование. ККТ селенида кадмия созданы методом коллоидного синтеза [1,6]. Прекурсорный раствор кадмия приготовлен следующим образом: оксид кадмия, олеиновая кислота и октадецен были нагреты в трехгорлой колбе (рис. 1) до 160°C для образования

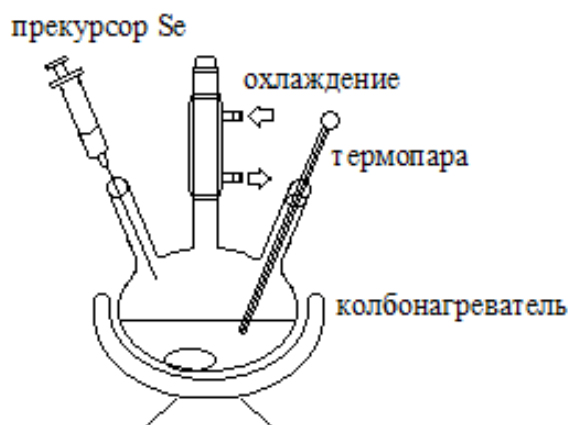


Рис. 1. Схема установки для синтеза коллоидных нанокристаллов

олеата кадмия. Прекурсорный раствор селена: порошок элементарного селена, олеиновая кислота и октадецен были подвергнуты ультразвуковому воздействию в течение получаса до образования равномерной суспензии. Раствор олеата кадмия был нагрет до 225°C , после чего суспензия селена инжестрирована в реакционный объем, что привело к нуклеации. Образцы отбирались по ходу реакции через определенные интервалы времени после инъекции: через 10 секунд после впрыскивания прекурсора селена; через 40 секунд; через 2 минуты; через 16 минут; через 2 часа.

Исследование образцов ККТ проводилось оптическими методами, в частности, измерялись спектры фотолуминесценции [7]. По величине ширины спектральной линии на половине высоты от максимума излучения можно определить дисперсию частиц по размеру. По положению максимума излучения на спектре можно оценить средний размер частиц в образце коллоидного раствора КТ. Для измерения спектров фотолуминесценции ККТ CdSe использовалась спектрометрическая установка [8] на основе светосильного двухрешеточного монохроматора СДЛ-1. Монохроматор позволяет регистрировать спектры фотолуминесценции в диапазоне длин волн от 200 до 6000 нм, с разрешением достаточным для поставленной задачи. В качестве источника возбуждения применялся полупроводниковый лазер с длиной волны 445 нм (Nichia NDB7875).

Результаты и их обсуждение. Измеренные спектры фотолуминесценции ККТ CdSe представлены на рис. 2. В левой части спектра располагаются интенсивные пики, полуширина которых лежит в пределах от 30 до 50 нм. В правой части спектра находятся пики со значительно большей полушириной линии (до 170 нм) и с существенно меньшей интенсивностью.

Пики фотолуминесценции, находящиеся в коротковолновой части спектра обусловлены экситонными переходами в ККТ, что и объясняет их большую интенсивность и относительно небольшую ширину на полувысоте максимума излучения. Образцы ККТ содержат большое число частиц разной величины, поэтому имеет место

уширение линии, связанное с дисперсией частиц по размерам.

По мере протекания реакции наблюдается увеличение интенсивности фотолуминесценции отбираемых образцов. Происходит это за счет увеличения количества вещества, вступающего в реакцию. За счет увеличения времени синтеза интенсивность фотолуминесценции удается увеличить в 1,7 раза.

С течением времени увеличивается средний диаметр частиц из-за объединения меньших частиц в более крупные [9]. Это подтверждается тем, что положение максимума пика фотолуминесценции с увеличением времени синтеза сдвигается в длинноволновую область (рис. 3). В нашем случае за счет увеличения времени синтеза от 10 секунд до 2 часов можно сместить максимум линии на 20–30 нм, что позволяет увеличить средний размер частиц в 1,1 раза.

Существование вторых пиков ФЛ в правой части спектра может быть объяснено влиянием поверхностных дефектов, проявляющих себя как уровни захвата внутри запрещенной зоны [10]. Наличие подобных дефектов является следствием несовершенства технологии [11]. Эти пики имеют полуширину порядка 170 нм и их максимумы сильно размыты по частоте в широких пределах, поэтому их следует рассматривать не как потенциально полезный сигнал, а как нежелательную засветку. Оценивая для каждого образца соотношение между максимумом основного и побочного пика можно заключить, что оптимальным вариантом с этой точки зрения является образец, имеющий время синтеза 2 минуты.

Проведенное исследование позволило оценить влияние некоторых параметров синтеза коллоидных квантовых точек на их спектральные характеристики. Влияние времени синтеза приводит к сдвигу максимума интенсивности фотолуминесценции в сторону больших длин волн на 20 нм, что свидетельствует об увеличении среднего размера синтезируемых частиц в 1,1 раз. Также увеличение времени синтеза приводит к возрастанию интенсивности фотолуминесценции в 1,7 раза из-за увеличения количества вещества, вступающего в реакцию. Полуширина

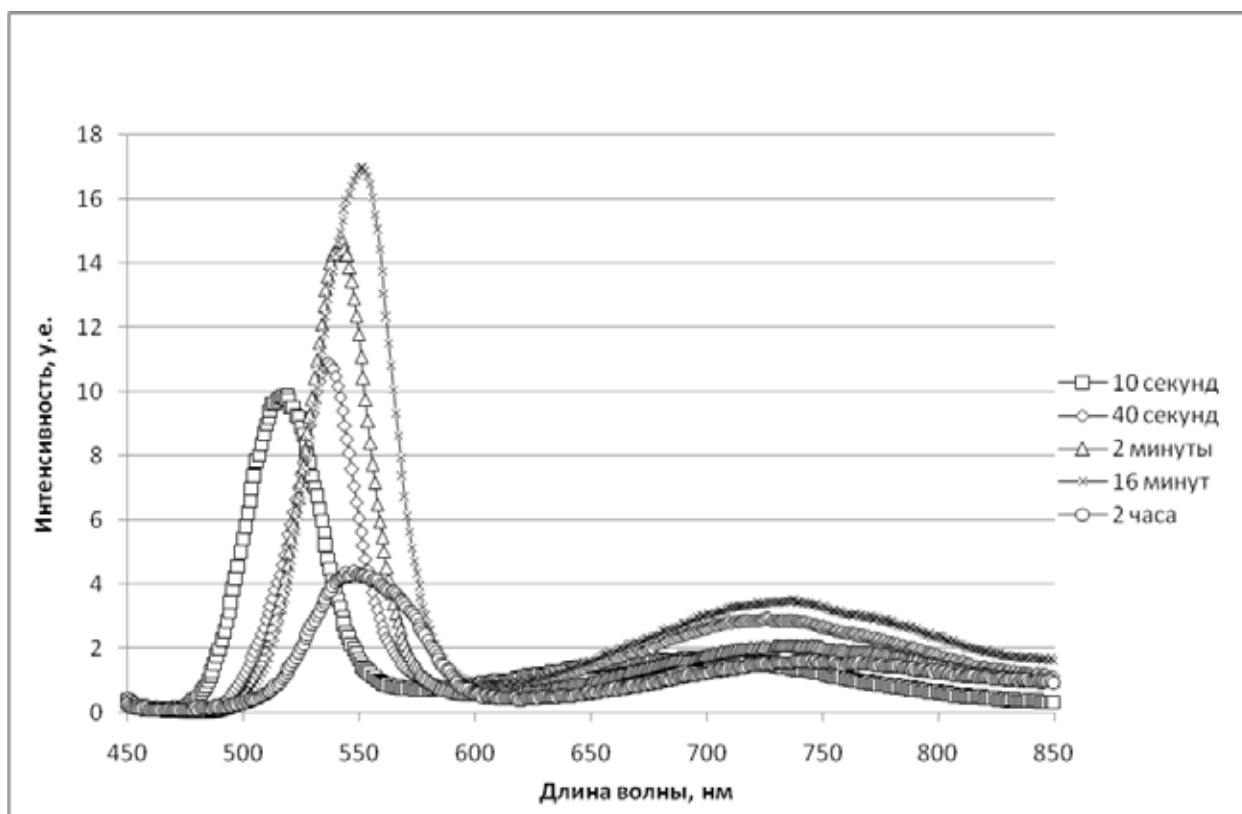


Рис. 2. Спектры фотолюминесценции коллоидных квантовых точек CdSe

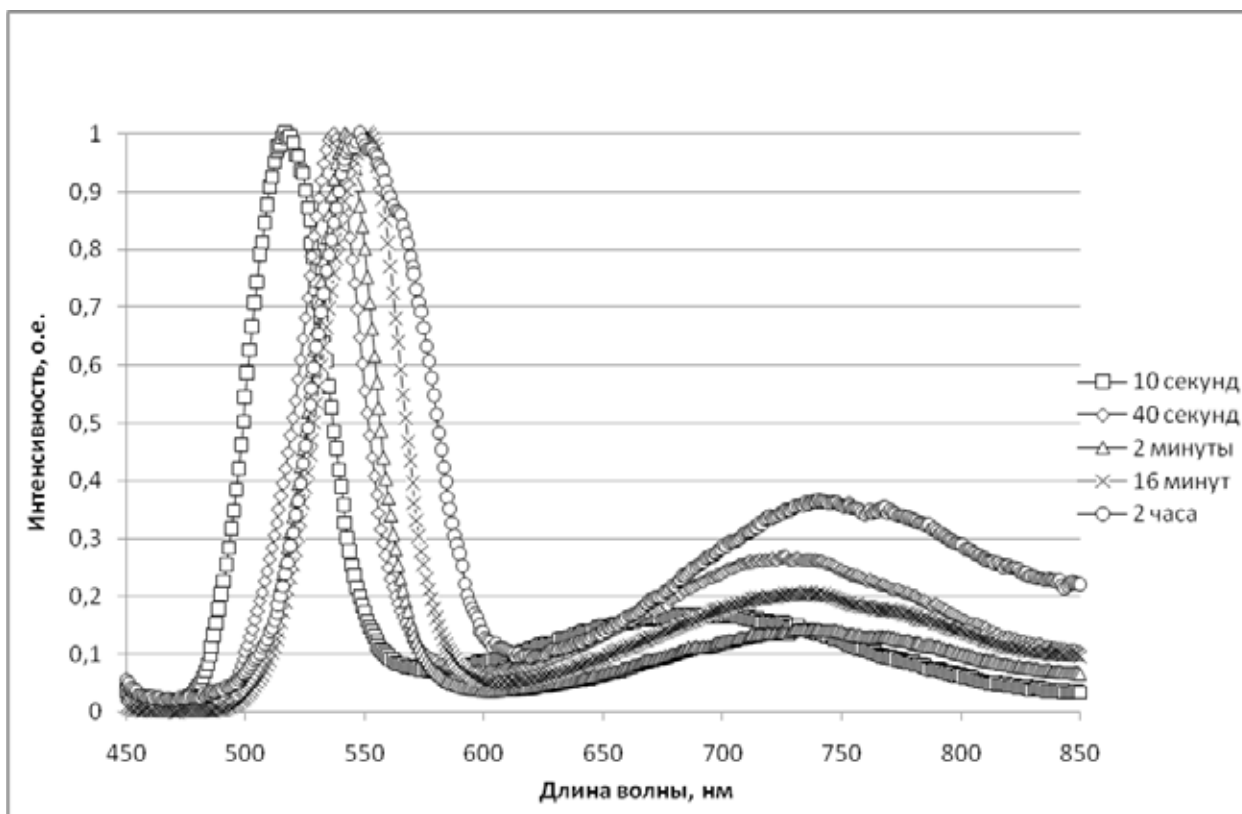


Рис. 3. Нормированные спектры фотолюминесценции коллоидных квантовых точек CdSe

линии уменьшается при увеличении времени синтеза до 2 минут и растет при увеличении времени синтеза до 2 часов. Таким образом оптимальными параметрами будут обладать ККТ с временем синтеза порядка 2 минут, поскольку интенсивность полезного пика для них будет одной

из самых высоких, а полуширина линии достаточно узкой. В числе недостатков данного метода синтеза стоит отметить наличие у созданных ККТ поверхностных дефектов, приводящих к появлению в спектрах фотолюминесценции дополнительных пиков в области длин волн 600–850 нм.

Литература:

1. Mikhailov, I. I., Tarasov S. A., Solomonov A. V., Aleksandrova O. A., Matyushkin L. B., Mazing D. S. The study of CdSe colloidal quantum dots synthesized in aqueous and organic media // *Journal of Physics: Conference Series* — 2014. — 572012029.
2. Тарасов, С. А., Александрова О. А., Ламкин И. А., Максимов А. И., Мараева Е. В., Михайлов И. И., Мошников В. А. «Люминесцентные свойства систем «пористые кремний содержащие матрицы — наночастицы PbS» // *Известия высших учебных заведений. Электроника*. — 2014. — №4 (108). — с. 21–26.
3. Tarasov, S. A., Aleksandrova O. A., Maksimov A. I., Maraeva E. V., Matyushkin L. B., Moshnikov V. A., Musikhin S. F. Study of the Self-Organization Processes in Lead Sulfide Quantum Dots // *Semiconductors*. — 2014. — No. 13 (Vol. 48). — с. 1729–1731.
4. Тарасов, С. А., Александрова О. А., Максимов А. И., Мараева Е. В., Матюшкин Л. Б. Исследование процессов самоорганизации квантовых точек сульфида свинца // *Известия высших учебных заведений. Электроника*. — 2013. — №3. — с. 28–32.
5. Александрова, О. А., Максимов А. И., Мараева Е. В., Матюшкин Л. Б., Мошников В. А., Мусихин С. Ф., Тарасов С. А. Синтез и самоорганизация квантовых точек сульфида свинца для люминесцентных структур, полученных методом испарения коллоидного раствора // *Нано- и микросистемная техника*. — 2013. — №2. — с. 19–23.
6. Mazing, D. S., Matyushkin L. B., Aleksandrova O. A., Mikhailov I. I., Moshnikov V. A. and Tarasov S. A. Synthesis of cadmium selenide colloidal quantum dots in aquatic medium // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2014. — 572012028.
7. Тарасов, С. А., Грачева И. Е., Гареев К. Г., Гордюшенков О. Е., Ламкин И. А., Менькович Е. А., Мошников В. А., Преснякова А. В. Атомно-силовая микроскопия и фотолюминесцентный анализ пористых материалов на основе оксидов металлов // *Известия высших учебных заведений. Электроника*. — 2012. — №2 (94). — с. 21–26.
8. Tarasov, S. A., Gracheva I. E., Gareev K. G., Gordyushenkov O. E., Lamkin I. A., Moshnikov V. A. Atomic Force Microscopy and Photoluminescence Analysis of Porous Metal Oxide Materials // *Semiconductors*. — 2012. — No. 13 (Vol. 46). — с. 1584–1588.
9. Михайлов, И. И., Тарасов С. А., Преснякова А. В., Романовский Д. С. Исследование эволюции спектров фотолюминесценции как метод анализа процессов роста коллоидных квантовых точек // *Известия Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета ЛЭТИ*. — 2013. — Т. 5. — с. 22–28.
10. Rogach, A. L., Kornowski A., Gao M., Eychmu1ller A., Weller H. Synthesis and Characterization of a Size Series of Extremely Small Thiol-Stabilized CdSe Nanocrystals // *J. Phys. Chem. B*. — 1999. — No. 103. — с. 3065–3069.
11. Mikhailov, I. I., Tarasov S. A., Solomonov A. V., Matyushkin L. B., Mazing D. S. The investigation of the luminescence properties of colloidal quantum dots based on cadmium chalcogenides // *Functional materials*. — 2014. — No. 2 (Vol. 21). — с. 142–145.

ХИМИЯ

Синтетические моющие средства: польза и вред

Абдрахманова Гульназ Альбертовна, студент

Пермская государственная фармацевтическая академия Минздрава России

В последние годы охране окружающей среды во всех странах мира уделяется большое внимание. Бытовая химия окружает нас везде. Начиная с самого утра, заходя в ванную, мы чистим зубы пастой, моем руки, посуду, стираем, и так продолжается весь день. Мне стали интересны препараты, которые делают нашу жизнь «чище и краше» и их безопасности для человеческого организма и окружающей среды.

Самое простое моющее средство было получено на Ближнем Востоке более 5000 лет назад. Скорее всего, оно было открыто по чистой случайности, когда над костром жарили мясо, и жир стек на золу, обладающую щелочными свойствами.

Первое синтетическое моющее средство появилось только в 1916 году. Изобретение немецкого химика Фрица

Понтера предназначалось для промышленного использования, бытовые синтетические моющие средства, более-менее безвредные для рук, стали выпускать в 1935 году [3]. С тех пор был разработан целый ряд синтетических моющих средств (СМС) узкого назначения, а их производство стало важной отраслью химической промышленности.

Средств изобретали всё больше и больше. Создавались новые рецепты и формулы, но по сей день, не был выявлен чисто экологический вариант.

В своей работе я попыталась выявить состав наиболее безопасных моющих средств, а так же их влияние на организм.

Синтетические моющие средства (СМС) — это жидкие, пастообразные и порошкообразные вещества, в состав которых входят:

Органические поверхностно-активные вещества	Обладают смачивающей, эмульгирующей, пептизирующей и пенообразующей способностью. Совокупность этих свойств обуславливает их моющее действие.
Анионоактивные вещества	Алкилсульфаты в зависимости от строения молекул делят на первичные и вторичные. Первичные сульфаты представляют собой продукты переработки природных жирных кислот; вторичные сульфаты — продукты переработки нефти.
Электролиты	улучшают эффект стирки и усиливают поверхностную активность моющих средств.
Сульфат натрия	используется для улучшения сыпучести порошка и растворимости его в воде, увеличивает моющую способность моющих средств
Фосфорные соли тринатрийфосфатов и полифосфатов	снижают щелочность моющих растворов до pH=7.
Оптические отбеливатели (персоли)	гидролизуются, выделяя атомарный кислород, который и является отбеливающим и дезинфицирующим агентом.
Отдушки	для удаления неприятного запаха
Красители	Придают ткани большую белизну и яркость за счет голубого оттенка.

ПАВ: содержатся в любом чистящем средстве, даже в обычном мыле.

Анионные ПАВ — Основным достоинством является относительно невысокая стоимость, эффективность и хо-

рошая растворимость. Но они наиболее агрессивны по отношению к организму человека.

Катионные ПАВ обладают бактерицидным свойством.

Неионогенные ПАВ — Основным достоинством является благоприятное действие на ткань и главное — 100 % биоразлагаемость.

Амфолитные ПАВ — в зависимости от среды (кислотность/щелочность) проявляют себя либо как катионные, либо как анионные ПАВы.

Отдушки: устраняют неприятный запах в порошкообразных СМС.

Водные смягчители, противодействующие эффекту ионов «жесткости» на других компонентах.

Окислители (хлорные и кислородные) для отбеливания, дезинфекции и разрушения органических соединений.

Консерванты для предотвращения от порчи других компонентов [4].

ПРИНЦИП РАБОТЫ СМС.

В состав СМС входят ПАВ, которые выполняют главную работу. ПАВ имеют два полюса — гидрофильный, то есть, тот, который любит воду, и гидрофобный, то есть, тот, который отталкивается водой, но легко соединяется с её противоположностью — с жирами. Основное назначение моющих средств — удаление загрязнений с различных поверхностей. Загрязнения прочно удерживаются на них за счет физико-химических сил, не смачиваются водой и поэтому практически ею не смываются. Чтобы перевести загрязнения в раствор, следует сделать их гидрофильными (смачивающимися). Молекулы ПАВ, адсорбируясь на грязевой частице, «притягивают» ее к воде, отрывают от поверхности препятствуют обратному прилипанию и слипанию частиц между собой. Таким образом, частицы переходят в раствор. Так как раствор поверхностно-активных веществ лучше смачивает поверхности, он проникает в мельчайшие поры и разрушает крупные частицы загрязнений [1].

ВЛИЯНИЕ НА ОРГАНИЗМ.

Пав могут попадать в наш организм при вдыхании, контакте кожи с моющим средством, через одежду и плохо промытую от средств посуду.

Итак, основные действующие вещества — это так называемые поверхностно активные вещества (ПАВ), которые представляют собой чрезвычайно активные хими-

ческие соединения. ПАВ при определенной концентрации способны вызвать нарушения важнейших биохимических процессов нарушить функцию и саму целостность клетки, существенно изменяют интенсивность окислительно-восстановительных реакций, влияют на активность ряда важнейших ферментов, нарушают белковый, углеводный и жировой обмен [2]. Но если внимательно рассмотреть этикетки стиральных порошков на прилавках наших магазинов, то можно заметить, что наши производители не особо заботятся о нашем здоровье, ведь концентрация поверхностно-активных веществ в них иногда доходит до 60 %. Это чревато нарушением иммунитета, развитием аллергии, поражением мозга, печени, почек, легких и нарушением передачи нервных импульсов в ЦНС. Особенно агрессивны в своих действиях анионные ПАВ.

Также следует избегать средств, в составе которых имеются следующие вещества:

Фенолы и крезолы в бытовой химии используются для усиления очищающих свойств, также обладают противомикробным эффектом. Эти бактерицидные вещества очень едки и могут вызвать диарею, головокружение, потерю сознания и нарушение функций почек и печени.

Формальдегид используется в некоторых моющих средствах для очистки пятен и поверхностей, кроме того, формальдегид добавляют в роли консерванта в различные клеи и лакокрасочные изделия.

Канцероген, вызывающий сильное раздражение глаз, горла, кожи, дыхательных путей и легких.

Фосфаты и фосфонаты содержатся в большинстве стиральных порошков в качестве смягчителя воды, но способны вызвать аллергические реакции кожи и поражение дыхательных путей. В настоящее время многие производители отказываются от введения в средства бытовой химии фосфатных добавок, заменяя их более экологичными веществами — цеолитами и поликарбоксилатами.

Гипохлорид натрия — хлор очень опасен, он является причиной заболевания сердечно-сосудистой системы, способствует возникновению атеросклероза, анемии, гипертонии, аллергических реакций, отрицательно влияет на кожу и волосы, повышает риск заболевания раком [3].

Сравнение СМС по нескольким показателям

Название/Свойства	pH	Хлорид ионы	Фосфат ионы	Растворимость	Пенообразование
Миф-автомат	9	+	-		4,7
TIDE	9	-	+		4,5
ARIEL	8	-	-		4,6
AOS	7		-	хорошая	13
Fairy	7,5		+	плохая	9

В ходе анализа исследований в литературных источниках были отобраны виды самых популярных порошков: «Миф-автомат», «TIDE», «ARIEL», а из посудомоющих средств «AOS», «Fairy». Лучшей моющей способностью обладают СМС «МИФ» (8 баллов) и «TIDE» (8 баллов),

с их помощью удаляются все виды загрязнений, но применение этих, а также СМС «ARIEL», требует осторожности из-за высокого уровня pH (9–10). Наиболее качественными являются средства, хорошо растворимые в воде, значит прозрачные. Косвенно можно судить о на-

личии а-ПАВ в стиральном порошке по интенсивности пенообразования при стирке. Чем выше пена, тем выше концентрация а-ПАВ. Наименее качественным средством для мытья посуды является Fairy, из-за щелочной рН среды и присутствия фосфат-ионов, а также из-за плохого смывания его с посуды и кожного покрова человека, что может привести к заболеванию внутренних органов.

Популярность СМС, пользующихся наибольшим спросом, обусловлена только работой рекламных компаний, так как моющие средства схожи по своему составу.

Можно использовать экологически «мягкие» бесфосфатные порошки (Далли актив плюс, сентимат колор) с низким содержанием ПАВ, у которых негативное действие на организм практически отсутствует. Загрязнения вымываются из тканей с помощью своеобразной «молекулярной стирки», даже без механического перемешивания и трения. Кроме того, после стирки на ткани, как правило, почти не остается частиц стирального порошка, что исключает необходимость многократного полоскания белья [5].

Литература:

1. Жиряков, В.Г. Органическая химия, изд. 6-е стереотип. М., 1997.
2. Юдин, А. М., Сучков В. Н., Корострелин Ю. А., «Химия для вас», г. Москва 1983 г.
3. «Краткая химическая энциклопедия» И. Л. Клунынец, г. Москва 1967 г.
4. Б. П. Никольский, Шульц М. М. «Химия», Ленинград 1972 г.
5. «Химический анализ» А. Я. Гурвич, г. Москва 1985 г.

Эффективное использование отходов химических опытов на лабораторных занятиях

Абдурахмонов Барат Маматмуродович, кандидат химических наук;

Алимкулов Сирожиддин Олимжон угли, студент;

Эшматов Абдуалим Бурибой угли, студент

Джизакский государственный педагогический институт (Узбекистан)

Алиева Раъно Азизовна, ассистент

Джизакский политехнический институт (Узбекистан)

Работа с малыми количествами реактивов не исключает вопроса использования отходов после проведения химических реакций. Эта работа необходима не только в целях экономии реактивов, а в первую очередь в целях воспитания учащихся (воспитание бережливости). На наш взгляд, выделение и использование веществ после химических опытов может стать одной из тем работы химического кружка. Такая работа будет воспитывать у учащихся бережное отношение к реактивам, будет развивать у них экспериментальные умения.

Использование остатков цветных металлов. В учебном эксперименте из цветных металлов расходуются цинк и медь. Цинк необходим для опытов при изучении

Таким образом, проанализировав результаты исследования выяснила, что в составе моющих средств могут быть вещества, способные нанести вред здоровью человека. Также выяснилось, что чистящие средства могут плохо смываться. Поэтому нужно ограничить использование синтетических веществ в повседневной жизни. Их можно заменить натуральными веществами: хозяйственным мылом, столовым уксусом, содой.

Более ответственно относитесь к выбору моющих средств и не позволяйте рекламам обманывать себя. Надеюсь, что в ходе прогресса будут изобретены более безопасные моющие средства, которые будут иметь возможность полностью растворяться в воде, не образуя вредных химических соединений.

Своей работой я лишь хочу попытаться привлечь внимание людей к этой проблеме, показать, что довольно просто защитить свое здоровье — руководствоваться простыми правилами техники безопасности при работе с моющими средствами и внимательнее относиться к выбору продукта.

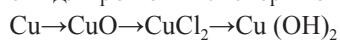
электрохимического ряда напряжений металлов. Его требуется около 10 г (из расчета, что в классе 30 учеников и каждый ученик для опыта получает одну гранулу цинка). При этом следует проследить, чтобы после образования слоя свинца учащиеся слили раствор, а цинк промыли водой. В этом опыте цинка расходуется очень мало (примерно 5% от взятой массы в течение 30 мин).

Гораздо больше цинка расходуется, когда его используют для получения водорода и опытов с ним. Для получения водорода ученику выдается 2–3 гранулы. Следовательно, на класс требуется около 30 г цинка (при индивидуальном выполнении опытов). После выполнения опытов ученик должен:

а) слить в специальный сосуд раствор сульфата (хлорида) цинка;

б) промыть цинк водой. Использование солей цинка будет рассмотрено в дальнейшем.

Ценным реактивом является порошкообразная медь. Она получается при восстановлении меди из оксида меди (II) водородом, предельными углеводородами (парафином, вазелином и другими органическими веществами). Обычно у учащихся при проведении опыта не полностью восстанавливается медь. Так как трудно разделить смесь, состоящую из мелкодисперсной меди и порошка оксида меди (II), то следует провести во внеурочное время полное восстановление меди из смеси. Полученная медь легко окисляется на воздухе при нагревании. Ее можно использовать для решения экспериментальных задач. Например:



Использование продуктов разложения. При разложении малахита и гидроксида меди (II) получается много оксида меди (II), который составляет от 70 до 81 % взятой массы. Образующийся оксид меди (II) прокаливают и используют для других опытов. Так как он получается в дисперсном состоянии, то имеет большую реакционную поверхность (активное состояние). Этим можно объяснить, что с таким оксидом меди (II) реакции протекают быстро. Например, серная кислота без нагревания вступает с ним в реакцию; быстрее проходит процесс восстановления меди из оксида меди (II) водородом, углеводородами.

Для получения кислорода и изучения его свойств обычно используют перманганат калия. На класс затрачивается до 40 г этого вещества. При разложении 40 г KMnO_4 получается примерно 35 г смеси оксида марганца (IV) и манганата калия K_2MnO_4 . Эта смесь может быть использована для получения хлора. При действии на 35 г смеси избытка концентрированной соляной кислоты можно получить 5,6 л хлора.

Из указанной смеси при необходимости можно выделить чистый оксид марганца (IV). Смесь обрабатывают водой до получения раствора фиолетового цвета:



После отстаивания сливают верхний жидкий слой. Это щелочной раствор перманганата калия, который может быть использован для изучения окислительно-восстановительных реакций на факультативных занятиях.

Осевший на дно оксид марганца (IV) можно отфильтровать, промыть, просушить и использовать для многих опытов. Из 40 г перманганата калия, израсходованного в опытах, можно получить 20 г оксида марганца (IV).

Продукты разложения перманганата калия могут быть использованы для дополнительного получения кислорода. Из 1 г марганцевых остатков (K_2MnO_4 и MnO_2) можно получить примерно 50–60 мл кислорода. Образуется он при взаимодействии манганата калия с фосфорной кислотой (MnO_2 в реакцию не вступает):



Реакция происходит при нагревании.

На 1 г марганцевых остатков необходимо 4 мл фосфорной кислоты. Так как реакция сопровождается вспениванием, то ее лучше всего проводить в колбе.

Продукты реакции (густая темная масса) разбавляют небольшим количеством воды и фильтруют. Выделенный оксид марганца (IV) несколько раз промывают водой и сушат.

В связи с тем что учащиеся не изучают соединения марганца, знакомить их с химизмом реакции не следует.

В опыте обезвоживания медного купороса получается большой выход сульфата меди. При его гидратации учащиеся ограничиваются, как правило, наблюдением образующихся кристаллов. Целесообразно в дальнейшем из продукта реакции приготовить раствор, необходимый для многих опытов.

Использование растворов веществ. При изучении водорода, воды и растворов, оксидов, гидроксидов, кислот и солей проводится большое число лабораторных опытов, при которых образуются растворы различных солей. Полученные растворы можно непосредственно использовать в опытах, или из этих растворов выделяют соли в твердом виде.

Опыты по получению водорода и изучению его свойств сопровождаются образованием растворов солей цинка или железа — сульфата или хлорида. Общий объем этих растворов большой. Так как по условиям реакции используется не вся кислота, она окажется в смеси с солью. Собрав с ученических столов раствор, необходимо довести реакцию кислоты с цинком (железом) до конца (с добавлением металла). Полученный раствор следует сохранить для проведения других опытов — при изучении амфотерности, проведении реакций обмена. Из раствора сульфата цинка или железа (II) можно путем упаривания выделить сухую соль. Хлорид цинка таким путем получить в кабинете не удастся из-за большой гигроскопичности.

Иногда в химическом кабинете отсутствует хлорид кальция, который необходим для обменных реакций. Между тем много образуется хлорида кальция при получении оксида углерода (IV) из карбонатов действием соляной кислоты. При использовании такого раствора необходимо полностью нейтрализовать кислоту карбонатом. Из 100 мл раствора хлорида кальция можно выделить 3–3,5 г соли.

Следует также сохранять и использовать растворы солей алюминия, получающиеся в опытах взаимодействия алюминия с кислотами; солей меди, получающиеся при реакциях оксида меди (II), гидроксида меди (II) с различными кислотами.

Растворы веществ, которые готовят учащиеся на уроках (растворы солей с определенной массовой долей растворенного вещества, растворы молярной концентрации), следует сохранять и затем использовать в химическом эксперименте.

Особого внимания заслуживают соединения серебра, получающиеся в результате реакций. Речь идет о реакции «серебряного зеркала» и нерастворимых солях серебра:

галогенидах и фосфатах (Ag_3PO_4). «Зеркало», или серебро в осадке, можно растворить в азотной кислоте (1:3). Полученным раствором можно пользоваться при распознавании галогенидов.

Нерастворимые соли серебра легко восстановить до свободного серебра. Для этого к солям приливают в два раза больше по объему серной кислоты (1:5) и добавляют несколько гранул цинка. Атомарный водород восстанавливает серебро:



Образовавшийся серовато-черный осадок серебра отфильтровывают, промывают дистиллированной водой и используют для приготовления нитрата серебра.

Выделение и использование органических веществ. По органической химии учащиеся проводят мало синтезов. Речь может идти о бромэтаноле и этилацетате (изоамилацетате). Этих веществ каждый ученик получает не более 5–10 капель. Тем не менее их необходимо обязательно собрать у учащихся, отделить синтезированные вещества от воды (делительной воронкой).

Полученный бромэтан промывают двойным объемом 10%-ного раствора соды и выливают в склянку, плотно закрывающуюся пробкой. Для осушки бромэтанола помещают в склянку несколько кусочков прокаленного хлорида кальция. Когда в лаборатории соберется 8–10 мл очищенного и осушенного бромэтанола, его подвергают перегонке на водяной бане. Фракцию с температурой кипения 35–40°C собирают в склянку, плотно закрыв ее пробкой.

С собранным этилацетатом поступают следующим образом: отделяют его с помощью делительной воронки,

промывают насыщенным раствором поваренной соли, затем водой, после чего осушают прокаленным сульфатом натрия. Через некоторое время эфир отделяют от осушителя и подвергают перегонке на водяной бане до температуры 79°C. Склянку с эфиром плотно закрывают пробкой.

Хотя изоамилацетата получается очень мало, однако его следует собрать, выделить из смеси с помощью делительной воронки, промыть раствором соды, осушить безводным сульфатом натрия. При перегонке собирают фракцию при температуре 143–145°C.

Собранные бромэтан, эфиры используют в качестве образцов.

Из рассмотренного видно, что при подготовке лабораторных опытов или практических работ учителю следует предусмотреть, какие продукты реакции нужно собрать. В связи с этим необходимо иметь сливы для различных веществ и выставлять их на демонстрационный стол, когда они требуются по содержанию занятий.

Безусловно, работа по использованию продуктов реакции является кропотливой, но вместе с тем интересной и необходимой. Для ее выполнения учителю химии следует привлечь лаборанта, членов химического кружка.

Возникает вопрос: нужно ли собирать все продукты реакций после выполнения опытов? Да, нужно в воспитательных целях. Однако не все они должны подвергаться очистке, не все они могут быть в дальнейшем использованы в работе (например, если будет очень малый выход продукта реакции, если образуется малоценный продукт и т. д.).

Литература:

1. Абдулхаева, М. М., Мардонов У. М. «Химия». — Ташкент.: Узбекистан, 2002.
2. Левченко, В. В., Иванцова М. А. «Опыты по химии с малым количеством реактивов». — М.: Учпедгиз, 1947.
3. Хомченко, Г. П., Севастьянова К. И. «Практические работы по неорганической химии с применением полумикрометода». — М.: Просвещение, 1976.

Лазерное инициирование композитов гексоген — алюминий

Ананьева Марина Владимировна, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник;
Зыков Игорь Юрьевич, аспирант
Кемеровский государственный университет

В рамках модернизированной микроочаговой модели инициирования теплового взрыва (учитывающей коэффициент эффективности поглощения наночастиц) рассчитаны зависимости критической плотности энергии инициирования композитов гексоген — алюминий от радиуса металлических наночастиц. Минимальные значения составили для первой гармоники неодимового лазера 158.8 мДж/см², для второй — 54.25 мДж/см². Для использования в оптическом детонаторе более перспективной является вторая гармоника неодимового лазера.

Ключевые слова: модель горячей точки, наночастица алюминия, гексоген, оптический детонатор.

Laser initiation of RDX-aluminium composites

Ananyeva Marina V, Zykov Igor Yu.
Kemerovo State University, Kemerovo °

The dependence of initiation critical energy density of the RDX-aluminium nanocomposites on the radius of the metal nanoparticles was calculated in terms of the hot-spot model (modernized model takes into account the metal nanoparticles' absorptivity). The value of the minimal critical density energy was 158.8 $\mu\text{J}/\text{cm}^2$ for the first harmonic, and 54.25 $\mu\text{J}/\text{cm}^2$ for the second harmonic of the Nd: YAG laser. The second harmonic of the Nd: YAG laser is considered to be more perspective for the optical detonator.

Keywords: hot-spot model, aluminum nano particles, cyclonite, optical detonator

Создание безопасных систем инициирования взрыва ведется на протяжении всей истории горнодобывающей промышленности. Предложенные системы оптического инициирования являются достаточно безопасными, однако всё ещё стоит вопрос о материале капсуля оптического детонатора. Используемые материалы на основе инициирующих взрывчатых веществ обладают высокой чувствительностью к лазерному излучению [1, с. 471, 2, с. 96, 3, с. 38], но неудовлетворительно чувствительны к удару и другим видам воздействия. Использование бризантных взрывчатых веществ может повысить порог инициирования к сопутствующим воздействиям (селективная чувствительность), но важным вопросом при этом остается сохранение высокой чувствительности материала к лазерному излучению. Одним из перспективных материалов среди таких веществ является пентаэритритатетранитрат (тэн). Чувствительность тэна к лазерному излучению экспериментально и теоретически исследована в работах [4, с. 99, 5, с. 804, 6, с. 68]. Экспериментально измеренные значения критической плотности энергии лазерного инициирования тэна, содержащего наночастицы алюминия, на длине волны 1064 и 532 нм отличаются почти в 2 раза [4, с. 99, 7, с. 38]. В работах [8, с. 14, 9, с. 213, 10, с. 341] показано, что вторичные взрывчатые вещества (ВВВ), содержащие наночастицы металлов, являются перспективным материалом для использования их в качестве состава капсуля оптического детонатора. Одним из наиболее используемых и безопасных [11, с. 10] ВВВ является гексоген, однако чувствительность этого материала, содержащего светопоглощающие наночастицы металла, к действию лазерного излучения не исследована. Поэтому моделирование влияния различных факторов [12, с. 42], в том числе спектральных, на чувствительность нанокомпозитов гексоген-алюминий к действию лазера является актуальной задачей. Целью настоящей работы является: расчет минимальной плотности энергии инициирования гексогена излучением первой и второй гармоник неодимового лазера.

Модель разогрева включений лазерным излучением

В случае прессованных таблеток гексогена, содержащих наночастицы алюминия, свет, попадающий в образец, претерпевает акты многократного отражения на границах зерен [13, с. 686, 14, с. 63]. В силу хаотичности отражения происходит усреднение освещенности по всем направлениям, что позволяет использовать при расчетах сферическую сим-

метрию, считая включение также сферическим [15, с. 12, 16, с. 19]. В модели проведен учет процессов нагревания наночастицы лазерным излучением, отвода тепла в энергетический материал, а также учитывается химическая реакция экзотермического разложения взрывчатого вещества [17, с. 195, 18, с. 127]. Совокупность процессов описывается системой дифференциальных уравнений в частных производных [6, с. 69, 19, с. 6, 20, с. 30]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= \alpha \cdot \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) + k_0 \frac{nQ}{c} \cdot \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right), x > R \\ \frac{\partial n}{\partial t} &= -k_0 n \cdot \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right), x > R, n = 1, \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= \alpha_M \cdot \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right), x < R. \end{aligned} \quad (1)$$

где T — температура, $E = 197.3$ кДж/(моль · К) — энергия активации процесса разложения, $k_0 = 2.02 \cdot 10^{18}$ с⁻¹ — предэкспонент, $Q = 3.792$ кДж/см³ — тепловой эффект реакции, $\alpha = 0.446 \cdot 10^{-3}$ см²с⁻¹ и $\alpha_M = 0.9730$ см²с⁻¹ — коэффициенты температуропроводности гексогена и алюминия [21, с. 126], R — радиус наночастицы, n — относительная концентрация реагента (гексогена).

На границе алюминий — гексоген $x = R$ происходит поглощение излучения, что приводит к граничному условию:

$$J(t) - c_M \alpha_M \cdot \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x \rightarrow R-0} + c \alpha \cdot \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x \rightarrow R+0} = 0, \quad (2)$$

где $c = 2.261$ Дж/см³К и $c_M = 2.435$ Дж/см³, К — объемная теплоемкость гексогена и алюминия, $J(t)$ — зависимость плотности мощности излучения лазерного импульса от времени [22, с. 93, 23, с. 90]:

$$J(t) = \sqrt{\pi} \cdot Q_{abs} R^2 k_i H_0 \cdot \exp(-k_i^2 t^2), \quad (3)$$

где $k_i = 8.235 \cdot 10^7$ с⁻¹ — параметр, определяющий длительность импульса (соответствует длительности импульса на полувысоте 20 нс); Q_{abs} — коэффициент эффективности поглощения, зависящий от радиуса включения, длины волны и материала матрицы и наночастицы. На границе рассматриваемой области (включение и слой энергетического материала толщиной $7R$) задавалось граничное условие первого рода $T = 300$ К [24, с. 376, 25, с. 6].

Методика расчета коэффициентов эффективности поглощения (Q_{abs}) сферическим включением радиуса (R) в рамках теории Ми описана в работе [26, с. 750]. Рассчитанные в рамках теории Ми зависимости коэффициентов эффективности поглощения от радиусов наночастиц алюминия в матрице гексогена для длин волн 1064 и 532 нм приведены на рисунке 1. При расчетах полагали, что коэффициент преломления гексогена составляет 1.5. Значения комплексных коэффициентов преломления алюминия на длинах волн 1064 и 532 нм составляли $0.978 - 8.030i$ и $0.5559 - 4.855i$, соответственно [27, с. 16]. Кривые имеют максимум, положение которого зависит от длины волны света. При уменьшении радиусов наночастиц кривая спадает до нуля, при больших радиусах Q_{abs} уменьшается с осцилляциями. Для первой гармоники неодимового лазера максимум эффективности поглощения наблюдается при радиусе частицы 104 нм, а для второй — при 46 нм. Кроме того, возрастает амплитуда максимума от 0.28 на длине волны 1064 нм до 0.654 на длине волны 532 нм. С ростом длины волны происходит уменьшение коэффициента эффективности поглощения, аналогичная зависимость характерна для наночастиц никеля [28, с. 6].

Результаты и выводы

В работе использована методика расчета критической плотности энергии иницирования (H_c) лазерным импульсом композитов тэн — наночастицы металла, сформулированная в [24, с. 376]. На рисунке 2 представлены рассчитанные зависимости критической плотности энергии от радиуса наночастицы алюминия в гексогене для первой и второй гармоник неодимового лазера. Для второй гармоники наименьшее значение H_c [29, с. 39] составляет 54.25 мДж/см² для включения радиуса (R_c) 45.5 нм. Соответствующие расчетные значения для первой гармоники составили 158.8 мДж/см² и 98.5 нм. Различия H_c для первой и второй гармоник неодимового лазера примерно в 3 раза определяются в первую очередь различиями в значениях коэффициентов поглощения включения на этих длинах волн. Значения критической плотности энергии иницирования для первой гармоники выше, чем для второй. Рассчитанные критические плотности энергии на первой и второй гармониках неодимового лазера различаются в композитах гексоген — алюминий в 2.9 раз. Следовательно, при оценке критической плотности энергии и радиуса наиболее опасного включения следует учитывать как теплофизические, так и оптические характеристики энергетического материала и материала включения.

В прессованных таблетках тэна содержащих наночастицы алюминия также наблюдается значительное увеличение чувствительности образца при переходе от первой ко второй гармонике неодимового лазера. На рисунке 3 представлены рассчитанные временные зависимости температуры в месте формирования очага реакции для различных значений плотности энергии второй гармоники неодимового лазера.

Из рисунка видно, что при значении плотности энергии иницирования меньше критического значения происходит нагрев системы с ее последующим остыванием, взрывного разложения не происходит. В случае превышения критической плотности энергии происходит тепловой взрыв. Однако индукционный период реакции — отсутствует. Реакция начинает интенсивно ускоряться во время действия импульса при незначительном превышении критической плотности энергии импульса. Отсутствие индукционного периода может стать отличительной характеристикой теплового взрыва от цепного, где после окончания импульса наблюдается выраженный индукционный период [1, с. 471, 2, с. 97].

Проведенные расчеты позволяют сделать вывод, что композит гексоген — алюминий является перспективными материалами для создания оптического детонатора, особенно при использовании для иницирования второй гармоники неодимового лазера.

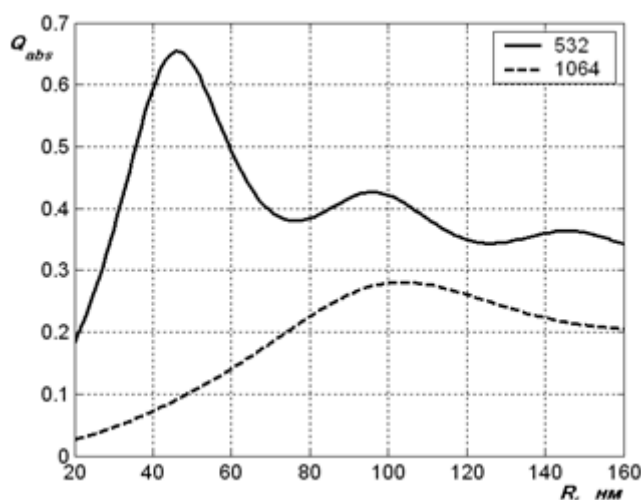


Рис. 1. Рассчитанные зависимости коэффициентов эффективности поглощения наночастиц алюминия в матрице гексогена от их радиуса на первой гармонике (1064нм) и второй (532нм) неодимового лазера

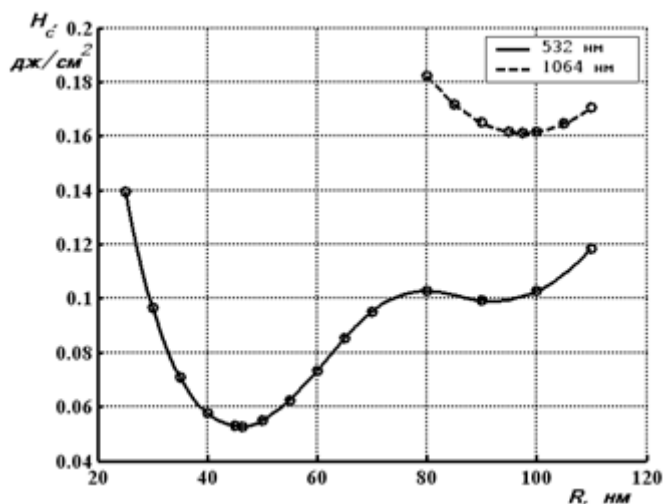


Рис. 2. Рассчитанные зависимости критической плотности энергии иницирования композитов гексоген — алюминий от радиуса металлических наночастиц для длин волн 532нм 1064нм

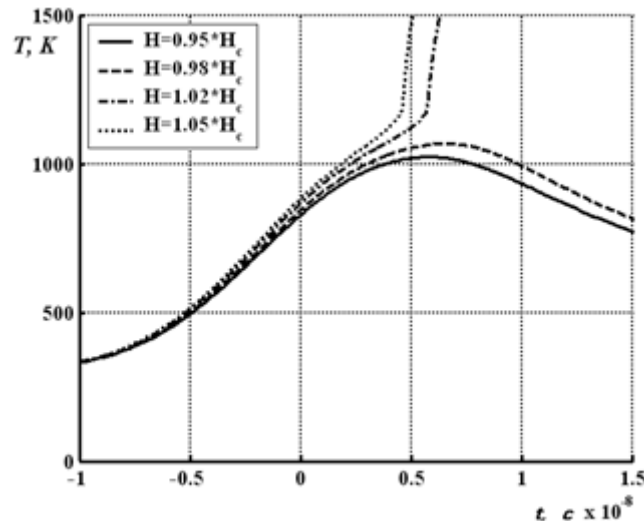


Рис. 3. Рассчитанные временные зависимости температуры в месте формирования очага реакции для значений плотности энергии, указанных в легенде

Литература:

1. Ananyeva, M.V. The size effects and before-threshold mode of solid-state chain reaction/M.V. Ananyeva, A.V. Kalenskii // Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Химия. — 2014. — Т. 7. — №4. — с. 470–479.
2. Боровикова, А.П. Методика моделирования распространения взрывного разложения азида серебра/А.П. Боровикова, А.В. Каленский// Аспирант. — 2014. — №4. — с. 96–100.
3. Боровикова, А.П. Пространственно-временные характеристики волны горения в азиде серебра/А.П. Боровикова, А.В. Каленский, И.Ю. Зыков// Аспирант. — 2014. — №3. — с. 37–42.
4. Каленский, А.В. Влияние длины волны лазерного излучения на критическую плотность энергии инициирования энергетических материалов/А.В. Каленский, А.А. Звекон, М.В. Ананьева и др. // Физика горения и взрыва. — 2014. — Т. 50. — №3. — с. 98–104.
5. Kalenskii, A.V. Spectral regularities of the critical energy density of the pentaerythriol tetranitrate-aluminium nanosystems initiated by the laser pulse/A.V. Kalenskii, M.V. Ananyeva // Наносистемы: физика, химия, математика. — 2014. — Т. 5. — №6. — с. 803–810.
6. Никитин, А.П. Расчет критических параметров инициирования теплового взрыва тэна с наночастицами меди на разных длинах волн/А.П. Никитин // Современные фундаментальные и прикладные исследования. — 2013. — №4 (11). — с. 68–75.
7. Адуев, Б.П. Взрывчатое разложение ТЭНа с нанодобавками алюминия при воздействии импульсного лазерного излучения различной длины волны/Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, Р.И. Фурега и др. // Химическая физика. — 2013. — Т. 32. — №8. — с. 39–42.
8. Ananyeva, M. V. Comparative analysis of energetic materials explosion chain and thermal mechanisms/M. V. Ananyeva, V.G. Kriger, A.V. Kalenskii and others // Известия высших учебных заведений. Физика. — 2012. — Т. 55. — №11–3. — с. 13–17.
9. Каленский, А.В. Взрывная чувствительность композитов тэн-алюминий к действию импульсного лазерного излучения/А.В. Каленский, И.Ю. Зыков, М.В. Ананьева и др. // Вестник КемГУ. — 2014. — №3–3 (59). — с. 211–217.
10. Каленский, А.В. Спектральная зависимость критической плотности энергии инициирования композитов на основе пентаэритриттетранитрата с наночастицами никеля/А.В. Каленский, М.В. Ананьева, А.А. Звекон и др.// Фундаментальные проблемы современного материаловедения. — 2014. — Т. 11. — №3. — с. 340–345.
11. Халиков, Р.М. Технологические схемы решения экологических проблем регионального производства материалов/Р.М. Халиков // Nauka-Rastudent.ru. — 2014. — №3 (03). — с. 10.
12. Масленников, Д.А. Столкновение лесного пожара с водным барьером/Д.А. Масленников, Н.А. Лощилова, А.А. Лощиков // Nauka-Rastudent.ru. — 2014. — №12–1. — с. 42.

13. Zvekov, A. A. Regularities of light diffusion in the composite material pentaerythritol tetranitrate — nickel/A. A. Zvekov, M. V. Ananyeva, A. V. Kalenskii and others // Наносистемы: физика, химия, математика. — 2014. — Т. 5. — №5. — с. 685–691.
14. Kalenskii, A. V. The Microcenter Heat Explosion Model Modernization/A. V. Kalenskii, V. G. Kriger, A. A. Zvekov and others // Известия ВУЗов. Физика. — 2012. — Т. 55. — №11/3. — с. 62–66.
15. Каленский, А. В. Коэффициент захвата электронных носителей заряда на экранированном отталкивающем центре/А. В. Каленский, М. В. Ананьева, В. Г. Кригер, А. А. Звекков// Химическая физика. — 2014. — Т. 33. — №4. — с. 11–16.
16. Кригер, В. Г. Релаксация электронно-возбужденных продуктов твердофазной реакции в кристаллической решетке/В. Г. Кригер, А. В. Каленский, А. А. Звекков // Химическая физика. — 2012. — Т. 31. — №1. — с. 18–22.
17. Ананьева, М. В. Кинетические закономерности взрывного разложения ТЭНа, содержащего наноразмерные включения алюминия, кобальта и никеля/М. В. Ананьева, А. В. Каленский, Е. А. Гришаева и др. // Вестник КемГУ. — 2014. — №1–1 (57). — с. 194–200.
18. Адуев, Б. П. Исследование оптических свойств наночастиц алюминия в тетранитропентаэритрите с использованием фотометрического шара/Б. П. Адуев, Д. Р. Нурмухаметов, Г. М. Белокуров и др. // Журнал технической физики. — 2014. — Т. 84. — №9. — с. 126–131.
19. Ананьева, М. В. Перспективные составы для капсуля оптического детонатора/М. В. Ананьева, А. А. Звекков, И. Ю. Зыков и др.// Перспективные материалы. — 2014. — №7. — с. 5–12.
20. Никитин, А. П. Расчет параметров инициирования взрывного разложения тэна с наночастицами хрома/А. П. Никитин // Современные фундаментальные и прикладные исследования. — 2013. — №2 (9). — с. 29–34.
21. Физика взрыва. под ред. Орленко Л. П., М.: Наука, 2004., Т. 1., С. 832.
22. Адуев, Б. П. Микроочаговая модель лазерного инициирования взрывного разложения энергетических материалов с учетом плавления./Б. П. Адуев, М. В. Ананьева, А. А. Звекков и др.// Физика горения и взрыва. — 2014. — Т. 50, — №6. — с. 92–99.
23. Газенаур, Н. В. Зависимость показателя поглощения меди от длины волны/Н. В. Газенаур, И. Ю. Зыков, А. В. Каленский // Аспирант. — 2014. — №5. с. 89–93.
24. Кригер, В. Г. Процессы теплопереноса при лазерном разогреве включений в инертной матрице/В. Г. Кригер, А. В. Каленский, А. А. Звекков и др. // Теплофизика и аэромеханика. — 2013. — Т. 20. — №3. — с. 375–382.
25. Ананьева, М. В. Допороговые режимы разветвленных твердофазных цепных реакций/М. В. Ананьева, А. В. Каленский // Актуальные инновационные исследования: наука и практика. — 2014. — №4. — с. 6.
26. Звекков, А. А. Моделирование распределения интенсивности в прозрачной среде с Френелевскими границами, содержащей наночастицы алюминия/А. А. Звекков, А. В. Каленский, А. П. Никитин и др.// Компьютерная оптика. — 2014. — Т. 38. — №4. — с. 749–756.
27. Каленский, А. В. Расчет коэффициентов эффективности поглощения наночастиц алюминия в прозрачных средах/А. В. Каленский, И. Ю. Зыков, А. П. Никитин // Все материалы. Энциклопедический справочник. — 2015. — №1. — с. 15–19.
28. Каленский, А. В. Оптические характеристики наночастиц никеля в прозрачных матрицах/А. В. Каленский, М. В. Ананьева, А. П. Никитин // Современные научные исследования и инновации. — 2014. — №11–1 (43). — с. 5–13.
29. Одинцова, О. В. Расчет взрывной чувствительности композитов пентаэритритатетранитрат-серебро к действию лазерного импульса/О. В. Одинцова // Современные фундаментальные и прикладные исследования. — 2014. — №4 (15). — с. 38–43.

Функциональнозамещенные производные алкенилфенолов в качестве ингибиторов коррозии стали Ст. 3

Аскарова Гюлю Мураз гызы, магистрант;
 Байрамов Муса Рза оглы, доктор химических наук, профессор;
 Агаева Махира Айбала гызы, кандидат химических наук;
 Мехтиева Гюнай Мюзакир гызы, кандидат химических наук;
 Алиева Севиль Гачай гызы, кандидат химических наук
 Бакинский государственный университет (Азербайджан)

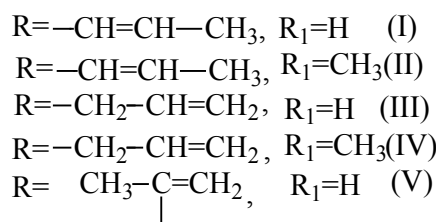
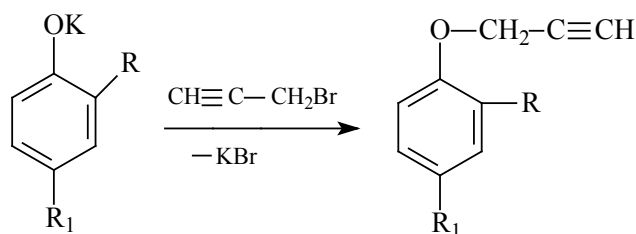
Одной из актуальных экономических проблем нефтедобывающей промышленности является коррозионное разрушение используемого оборудования, трубопроводов и др. металлических конструкций в результате электрохимической и биологической коррозии под воздействием различных солей, CO_2 , H_2S , кислот, а также сульфатовосстанавливающих (СВВ) бактерий и микроорганизмов [1–4]. В последние годы стали ее рассматривать и как серьезную экологическую проблему, связанную с рассеиванием в окружающей среде (в водных бассейнах и почве) в больших количествах не пригодного к использованию металла. Широко используемым на практике методом вторичной добычи нефти является заводнение пластов речной, морской и др. водами [5]. При этом возникает опасность заражения нефтяных пластов СВВ, которые в результате своей жизнедеятельности продуцируют H_2S , являющийся коррозионно-агрессивным веществом. В таких системах с целью снижения скорости коррозии металла, стали применять методы заводнения с использованием безопасных водорастворимых ингибиторов [6–8]. Действие последних всегда связано с изменением состояния защищаемой поверхности вследствие адсорбции (и нередко хемосорбции), с образованием защитных пленок на металле или образования с катионами металла труднорастворимых соединений [9].

На защитные свойства соединений, используемых в агрессивных средах, в первую очередь, оказывает влияние их строение, наличие в них определенных атомов и функциональных групп. Соединения, содержащие заместители с этиленовой и ацетиленовой связями обладают не только адсорбционными, но и антимикробными. За счет наличия в них подвижных π -электронов облегчается адсорбция на металле и образование хемосорбированных пленок [10].

В настоящей статье приводятся результаты наших исследований по разработке новых ингибиторов коррозии, содержащих заместители с двойной и тройной связями, на основе алкенилфенолов.

Среди ингибиторов широко используемых на практике для защиты нефтяного оборудования от сероводородной и углекислотной коррозии есть и соединения, полученные на основе алкилфенолов и аминов (например, Неонол ФОМ 9–12 и др.) [2].

С целью синтеза новых соединений фенольного типа (производных алкенилфенолов) были использованы 2-пропенил-, 2-пропенил-4-метилфенол; 2-аллилфенол и 4-изопропенилфенол. Осуществлены их реакции с пропаргилбромидом (при соотношении 1:1 моль) в присутствии водного и спиртового раствора KOH по схеме:



Структуры всех синтезированных соединений были установлены ЯМР-спектроскопией (не спектрометре «Bruker 300», фирмы Bruker, Германия)

Испытания соединений (I–V) проводились в системе, состоящей из 3%-ного водного раствора NaCl и углеводов (керосина), взятых в соотношении 9:1 об.

Следует отметить, что концентрация NaCl в морской воде составляет около 2–3%, поэтому в лабораторных исследованиях использовали вышеуказанную концентрацию, (при концентрации 10% и более имеет место пассивация поверхности металла).

Испытания проводили при 25°C гравиметрическим методом в течение 5 час на пластинках из стали Ст. 3. Концентрацию соединения изменили от 10 до 50 мг/л. Тщательно очищенные и подготовленные пластинки, взвешиваются на аналитических весах и выдерживаются в водносолевой и углеводородной среде, содержащей испытуемое соединение в определенной концентрации или не содержащее его. Далее пластинки после испытания вновь взвешивают. По потере массы пластинки (в отсутствие и при-

существовании соединения), вычисляется скорость коррозии (K , $\text{г/м}^2 \cdot \text{час}$) и защитный эффект (Z , %):

$$Z = \frac{K_1 - K_2}{K_1} \cdot 100\%$$

где K_1 — скорость коррозии без какого-либо ингибитора, $\text{г/м}^2 \cdot \text{час}$

K_2 — скорость коррозии в присутствии испытуемого соединения, $\text{г/м}^2 \cdot \text{час}$

Было установлено, что соединения I и II, полученные на основе 2-пропенил- и 2-пропенил-4-метилфенола, обладают более высокими защитными свойствами по отношению к стали Ст. 3. При их концентрации 10 мг/л $Z=83-85\%$, а при 50 мг $Z=99-100\%$. Соединения III и IV, содержащие не сопряженную с ароматическим кольцом кратную связь (в аллильном радикале),

по своим защитным свойствам уступают первым двум. При их концентрации 10 мг/л степень защиты от коррозии составляет в среднем 66–68%, а при 50 мг/л 82–84%.

Соединение V, содержащее в структуре изопропенильную группу в пара-положении по отношению к ОН-группе, по защитным свойствам примерно находится на уровне соед. I и II (при его концентрации 10 мг/л $Z=84\%$).

Из результатов испытаний синтезированных новых соединений, содержащих в своих структурах одновременно заместители с этиленовой и ацетиленовой связями, можно сделать вывод о возможности их использования в качестве ингибиторов коррозии металлов в водно-солевых и углеводородных (нефтяных) системах. В настоящее время проводятся работы по изучению их свойств в системах, содержащих соли, различные углеводороды и H_2S .

Литература:

1. Д. Б. Кудрявцев, А. Р. Пантелеева, А. В. Юрина, Нефтехимия, 2009, т. 49, №3, с. 211–216.
2. А. Н. Маркин, Защита металлов, 1994, т. 30, №1, с. 51–58.
3. М. Г. Велиев, А. З. Чалабиева, И. А. Везирова, Нефтехимия, 2010, т. 50, №6, с. 492–496.
4. Пат. 2272789 Россия, 2006.
5. В. И. Левашова, Т. П. Мудрик, Нефтехимия, 2008, т. 48, №4, с. 311–314.
6. Ф. А. Зайнуллин, Научно-техн. вестник Поволжья, 2012, №6, с. 50–53.
7. В. А. Антипин, В. И. Левашова, Нефтехимия, 2002, т. 42, №6, с. 475–478.
8. Ю. И. Кузнецов, Л. П. Казанский, Успехи химии, 2008, т. 77, №3, с. 227–241.
9. Ю. И. Кузнецов, Успехи химии, 2003, т. 73, №1, с. 79–93.
10. С. М. Решетников, Ингибиторы кислотной коррозии металлов, Л. Химия, 1986, с. 144.

Сорбция паров воды и поровые характеристики полученных сополимеров

Бозорова Найима Худойбердиевна, кандидат химических наук, ассистент;
Рахматов Худоёр Бобониёзович, кандидат химических наук, зав. кафедрой;
Караев Аббос Тоштемирович, студент
Каршинский инженерно-экономический институт (Узбекистан)

Известно, что для выяснения структурных особенностей полимеров часто проводятся исследования сорбции паров воды. Пары воды являются активным сорбатом по отношению ко многим полимерным материалам, что особенно ярко проявляется в полимерах с гидрофильными группами и, в определенной степени, играет роль и пористость ионита. Механизм образования пористой структуры полимеров определяется, главным образом, природой порообразователя (инертного растворителя), тогда как сшивающий агент обеспечивает устойчивость образованной пористой структуры по отношению к смене или удалению растворителя. Механизм образования пористой структуры зависит также от природы растворителя и количества сшивающего агента. Влияние количества сшивающего агента, инертного рас-

творителя и др. факторов подробно изучено на примере синтеза сополимеров стирола с рядом дивинильных мономеров.

Нами изучено влияние количества сшивающего агента ГТТ на удельную поверхность ($S_{уд}$), суммарный объем пор (W_0) и радиус пор (r_k) сополимеров акрилонитрила с ГТТ.

Для расчета удельной поверхности сорбентов, для которых характерны S-образные изотермы сорбции, использовали уравнение БЭТ.

$$\frac{p/p_0}{x \left(1 - \frac{p}{p_0}\right)} = \frac{1}{x_m C} + \frac{C-1}{Cx_m} \cdot \frac{p}{p_0} \quad (1)$$

где p — равновесное давление пара сорбата над сорбентом;

p_0 — давление насыщенного пара сорбата при той же температуре;

x — количество сорбированного вещества, г/г;

x_m — количество вещества в сплошном мономолекулярном слое, г/г;

C — постоянная, представляющая отношение времени жизни молекул в первом слое и жидкости соответственно.

Согласно уравнения (1), зависимость $p/x(p_0-p)$ от p/p_0 выражается прямой линией, по тангенсу угла наклона которой S -отрезку I, отсекаемому прямой на оси ординат, можно рассчитывать величина x_m и C :

$$x_m = \frac{1}{S+i} \cdot C = \frac{S+1}{i} \quad (2)$$

Удельная поверхность S ($\text{м}^2 \cdot \text{г}^{-1}$) связана с емкостью монослоя уравнением

$$S = \frac{x_m}{M} \cdot N_A \cdot A_m \cdot 10^{-20} \quad (3)$$

где M — молекулярная масса адсорбата;

N_A — число Авагадро ($6,02 \cdot 10^{23}$ моль $^{-1}$);

A_m — площадь поперечного сечения молекул адсорбата (Å^2), т. е. площадь которую адсорбированная молекула занимает на поверхности твердого тела в заполненном монослое.

A_m подсчитывается по уравнению:

$$A_m = 1.091 \cdot \left(\frac{M}{\rho N_A} \right)^{2/3} \cdot 10^{16},$$

$$A_m(H_2O) = 10,51 A^2$$

где M — молекулярная масса сорбируемого вещества, г/моль;

ρ — его плотность, г/см 3 ;

суммарной объем пор W_0 (см 3 /г) вычисляется по уравнению:

$$W_0 = \frac{x_{\max}}{\rho}$$

где x_{\max} — количество максимально сорбированного веществ, г/г;

ρ — его плотность, г/см 3 ;

средний размер пор (Å) определяется соотношением

$$r_k = \frac{2W_0}{S_{\text{уд}}} \cdot 10^{-4}$$

Если пренебречь адсорбцией на стенках, то x_1/ρ было бы равно объему W_{r_1} всех пор, имеющих радиусы до r_1 включительно. Согласно гипотезе капиллярной конденсации, все эти поры будут заполнены, когда относительное давление достигает значения p_1/p_0 , которое выражается “уравнением Кельвина”:

$$\ln \left(\frac{p}{p_0} \right) = - \frac{2V\sigma}{rRT} \cdot \cos \varphi$$

где σ — поверхностное натяжение, дин · см $^{-1}$;

V — молярной объем жидкости, см 3 · моль $^{-1}$;

φ — краевой угол мениска жидкости со стенками капилляра.

Отрицательно знак свидетельствует о том, что p будет меньше p_0 , если краевой угол меньше 90° . При $\varphi = 0$, т. е. что жидкость смачивает стенки пор, уравнением Кельвина при этом приобретает следующий вид:

$$\ln \left(\frac{p}{p_0} \right) = - \frac{2V\sigma}{rRT}$$

Это позволяет для данной жидкости непосредственно рассчитать значение радиуса цилиндра r_1 соответствующее заданному значению p_1/p_0 или, наоборот, значение относительного давления, соответствующее заданному радиусу.

Теплота чистой адсорбции E_{adc} (ккал · моль $^{-1}$) вычисляется по уравнению:

$$E_{\text{adc}} = RT \cdot \ln C$$

При этом предполагается, что молекула во всех слоях после первого рассматривается как совершенно эквивалентные, а число адсорбированных молярных слоев становится бесконечным, когда достигается давление насыщенного пара, а также пренебрегается членом

$RT \ln \frac{a_1 \vartheta_2}{a_2 \vartheta_1}$ в уравнении:

$$E = E_1 - L = RT \ln C - RT \ln \frac{a_1 \vartheta_2}{a_2 \vartheta_1}$$

где E_1 — энергия активации десорбции;

L — скрытая теплота конденсации;

a_1, a_2 — коэффициенты конденсации молекул газовой фазы на молекулах первого и второго слоях соответственно;

ϑ_1, ϑ_2 — частоты колебаний молекул в первом и втором слоях соответственно;

Поэтому значение E_{adc} имеет приближенный характер.

Сорбцию паров воды изучали при 298 К на вакуумной сорбционной установке Мак-Бена с пружинными весами. Остаточное давление (10^{-3} тор) контролировали ионизационным термовакuumметром ВИТ-ЗМ. Привес образцов и разность уровней в коленах U-образного манометра измеряли при помощи катетометра КМ-6 с точностью $\pm 0,02$ мм.

На рис. 1 приведена зависимость степени сорбции от количества порообразователя толуола.

Как видно из рис. 11 ход изотерм сорбции гелевого и пористых сополимеров с различной добавкой толуола резко отличаются между собой пористостью по сравнению остальных образцов, а добавка 10 % толуола фактически не приводила к заметным качественным изменени-

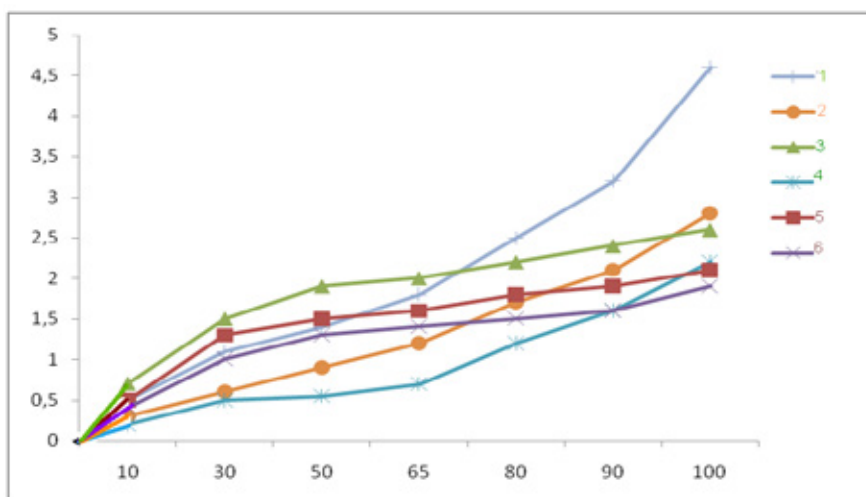


Рис. 1. Изотермы сорбции паров воды сополимерами

АН: ГТТ, полученных в присутствии толуола.

1 — после гидролиза; 2 — ДЭА 30%; 3 — Соплимер модифиц. ГА; 4 — ДЭА 10%;

5 — АН: СА (95:5) (гелевый образец) и 6 — 30% толуола соответственно сополимеры

Таблица 1. Поровые характеристики сополимеров, полученных в присутствии различных количеств порообразователя толуола

Образец	Ёмкость монослоя, X_m , г/г	Удельная поверхность, $S_{уд}$, м ² /г	Суммарный объем пор, W_0 , см ³ /г	Средний радиус пор, r_k , Å
АН: СА (95:5) *	0,0142	49,80	0,021	8,43
Сополимер модифиц. ГА,	0,0135	47,55	0,026	10,93
30% толуола	0,0058	20,55	0,019	18,49
ДЭА 10%	0,0052	18,38	0,022	15,55
ДЭА 30%	0,0052	51,70	0,028	10,83
После Гидролиза	0,0102	36,03	0,046	25,53

* — гелевый образец

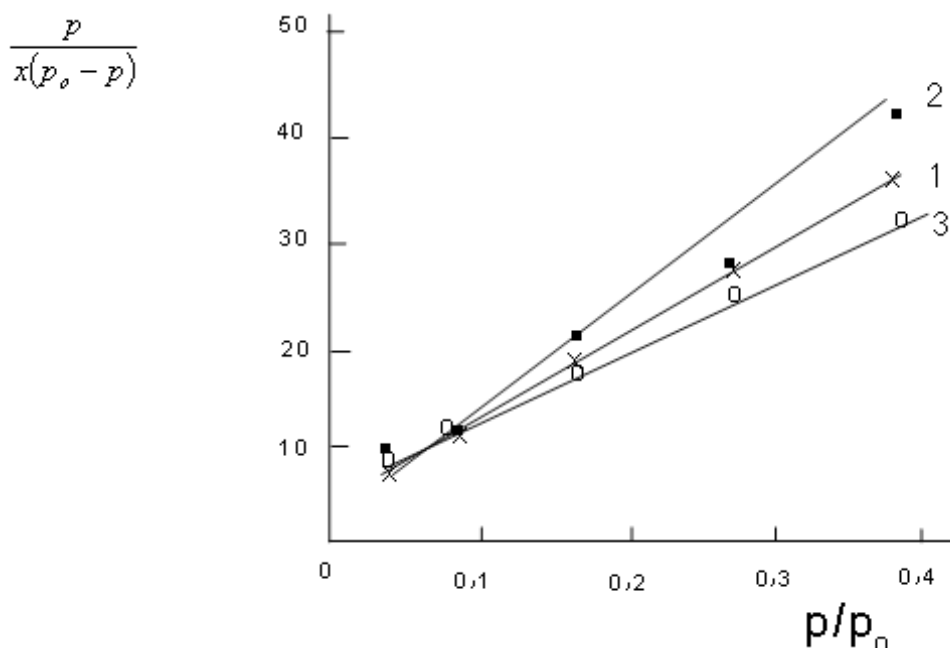


Рис. 2. Изотермы адсорбции водяного пара в координатах уравнения БЭТ образцами сополимеров АН с ГТТ. 1, 2, 3 — соответственно гелевый образец, 10 и 30% толуола

Таблица 2. Поровые характеристики сополимеров АН с ГТТ, полученных в различных условиях

Образец	S	i	C	x_n , г/г	Суд м ² /г	W^0 , см ³ /г	r_{kr} , Å	$E_{адср}$ ККАЛ МОЛЬ
АН: СА (95:5) *	93,42	10,5	8,90	0,0142	49,80	0,021	8,43	1,294
Сополимер модифиц. ГА,	118,95	6,8	17,49	0,0135	47,55	0,026	10,93	1,693
30% толуола	79,21	4,9	16,17	0,0058	20,55	0,019	18,49	1,647
ДЭА 10%	92,69	5,9	15,71	0,0052	18,38	0,022	15,55	1,630
ДЭА 30%	83,85	3,2	26,20	0,0052	51,70	0,028	10,83	1,932
После гидролиза	75,0	5,5	13,64	0,0102	36,03	0,046	25,53	1,546

*-гелевый образец

ям в структуре сополимера. Результаты определения поровой характеристики сополимеров приведены в табл. 1.

На рис. 2 представлены зависимости $\frac{p}{x(p_0 - p)}$ от p/p_0 для сополимеров АН с ГТТ, полученных в присутствии различных количеств толуола.

Как видно из рис. 2 изотермы адсорбции паров воды в координатах уравнения БЭТ зависимость $\frac{p}{x(p_0 - p)}$

от $\frac{p}{p_0}$ имеет прямолинейный характер в области низких давлений. Это подтверждает применимость уравнения БЭТ для характеристики изотерм сорбции водяного пара сополимерами АН с ГТТ.

На основании изотерм сорбции были рассчитаны поровые характеристики сополимеров, которые приведены в таблице 2.

Данные показывают, что суммарный объем пор увеличивается с увеличением количества порообразователя. Для значений средних радиусов пор не наблюдается отчетливая закономерность.

Циклические металлоорганические производные ферроцена и цимантрена

Гаджиева Севиндж Рафик кызы, доктор химических наук, профессор;

Кадырова Эльмина Мусрет кызы, кандидат химических наук, преподаватель;

Алиева Тарана Ибрагим кызы, кандидат химических наук;

Рафиева Гиджран Латиф кызы, старший лаборант, доктор философии по химическим наукам;

Рустамова Ульвия Нушираван кызы, доцент

Бакинский государственный университет (Азербайджан)

Были получены циклические металлоорганические производные ферроцена и цимантрена прямым оксиалкилированием литиевых производных ферроцена (цимантрена) циклическими кетонами — циклопентанон (циклогексанон) в условиях межфазного катализа. Путем последующего взаимодействия синтезированных карбинолов с N, N — циклогексил (2-гидрок-си) пропиламином получены соответствующие эфирные производные ферроцена. Строение целевых продуктов доказано с помощью методов ЯМР ¹H и ИК-спектроскопии.

Ключевые слова: ферроцен, цимантрен, комплексообразование, циклопентанон, циклогексанон, ЯМР ¹H, ИК-спектроскопия.

Cyclic organometallic derivatives of ferrocene and cymantrene

S. R. Hacıyeva; E. M. Gadirova; T. İ. Aliyeva

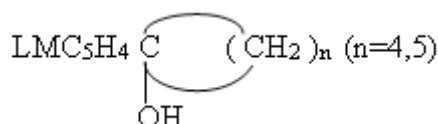
Baku State University

Synthesized previously unknown cyclic organometallic ferrocene derivatives and direct cymantrene oxyalkylating lithium derivatives of ferrocene (cymantrene) cyclic ketones-cyclopentanone (cyclohexanone) under phase transfer

catalysis. By subsequent reaction with synthesized carbinols N, N — cyclohexyl (2-hydroxy-phenoxy) propylamine obtained corresponding ether derivatives of ferrocene. The structure of final products using the methods shown ¹H NMR and IR spectroscopy.

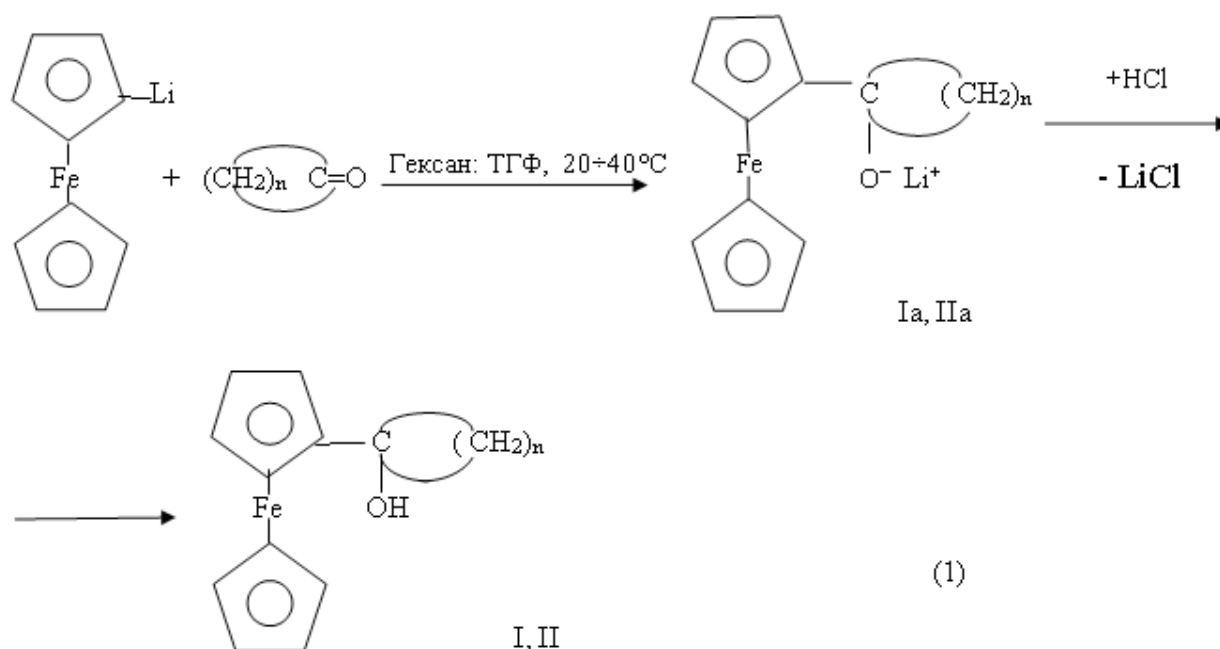
Keywords: ferrocene, cymantrene, complexation, cyclopentanone, tsiklageksanon, ¹H NMR, IR spectroscopy.

Продолжение исследований в области синтеза и изучения свойств моно — LVC₅H₄C(R₁R₂)OH и биядерных [LMC₅H₄]₂C(R)OH карбинольных производных ферроцена и цимантрена (где LM=C₅H₅Fe, (OC)₃Mn, R₁=alk, R₂=aril, R₁=R₂) [1] явились экспериментальные данные по синтезу, установлению составов, структурных и некоторых других физико-химических характеристик ферроценил-, (цимантренил-), циклопентил-, (циклогексил-) металлоорганических (карбинольных) производных:



Для получения вышеуказанных соединений, были осуществлены реакции между литиевыми производными ферроцена — C₅H₅FeC₅H₄Li, цимантрена — (OC)₃MnC₅H₄Li [1] как с циклопентаном, так и циклогексаном. Оказалось, что проведение реакции с участием литиевого производного ферроцена (C₅H₅FeC₅H₄Li) независимо от природы циклического кетона приводят не только к образованию ферроценилциклопентилкарбинольных (I) ферроценилциклогексилкарбинольных (II) производных, но и различных продуктов взаимодействия не прореагировавших в целевой реакции циклических кетонов с перекурсором получения литиевых производных метал-локомплексов-бутиллитием («BuLi»).

Установлено, что в присутствии смеси растворителей (гексан — тетрагидрофуран, ТГФ), взятых в соотношении (1:1), в результате взаимодействия между литиевым производным ферроцена и циклопентаном (циклогексаном) в температурном интервале 20 ÷ 40 °С, в течении 2–3 часов происходит образование соответствующих металлоорганических производных ферроцена I и II с выходом 26–28 %.



где в I и Ia, n=4; в II и IIa, n=5

Предполагаемой причиной образования ферроценилкарбинольных производных I и II по реакции (1) с достаточно низкими выходами является, во-первых, степень литирования ферроцена с участием BuLi, как в неполярных растворителях, например, в гексане, так и в полярных растворителях, например в ТГФ, не превышает 60–65 % [2]. Во-вторых, за счет низкой селективности процесса литирования, происходит образование смеси моно (C₅H₅FeC₅H₄Li) дизамещенных производных ферроцена (LiC₅H₄FeC₅H₄Li), параллельно вступающих во взаимодействие с циклическими кето-

нами, и тем самым усложняющих состав конечных продуктов реакции. В-третьих, вследствие нестабильности литиевых производных затруднен процесс их разделения, что обуславливает необходимость их совместного вовлечения в реакцию.

Следует также отметить, что синтезированные упомянутым способом как монолитиевые, так и дилитиевые производные ферроцена, из-за низкой стабильности, невозможно хранить и использовать как готовые реагенты в соответствующих реакциях (1).

Поэтому с целью обеспечения высокой селективности получения монолитийферроцена в процессе литирования ферроцена с помощью BuLi, были изучены как температурные факторы, так и сольватирующая способность растворителей, используемых для целевой реакции.

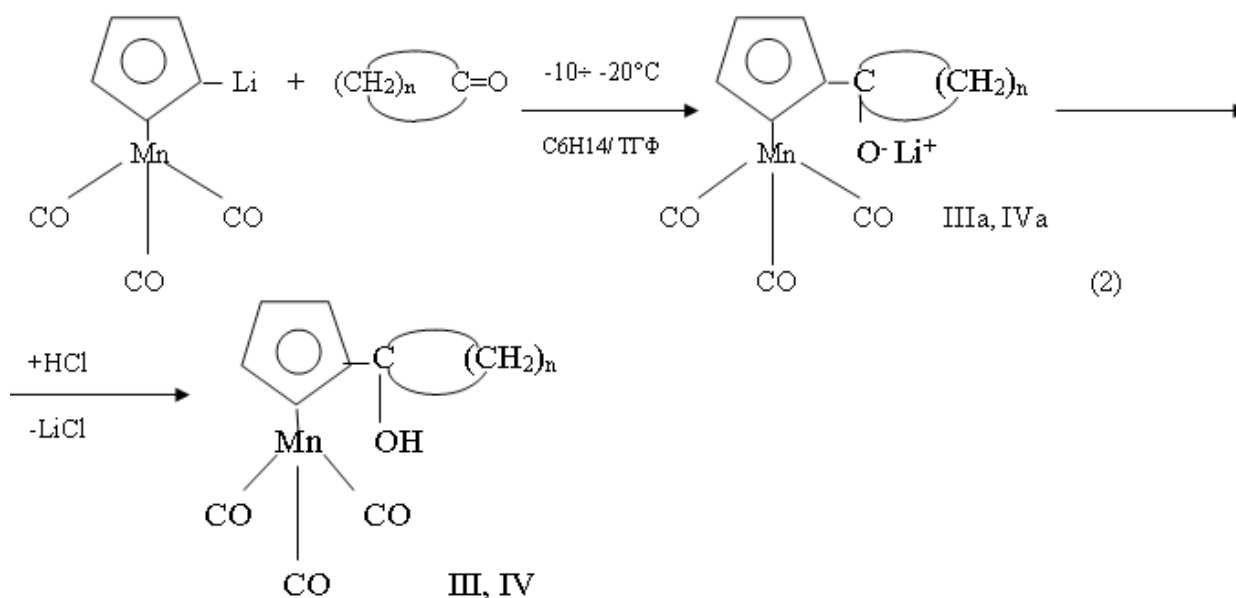
При этом обнаружено, что при температуре $10 \div 40^\circ\text{C}$, независимо от соотношения ферроцен: BuLi, как указывалось выше, наблюдается литирование обоих циклопентадиенильных колец ферроцена. В связи с этим образуется соль моно- и дилитийзамещенных производных ферроцена, разделение которой с получением индивидуальных соединений из-за легкого окисления и гидролиза, не представляется невозможным.

С другой стороны, при осуществлении взаимодействия ферроцена с BuLi при пониженной ($-20 \div -40^\circ\text{C}$) температуре, в среде гексана наблюдается только следы продукта литирования, а в сильно полярных растворителях, например, в тетрагидрофуране и диметилсульфоксиде при этой же температуре взаимодействие протекает очень быстро, однако, не очень высокой селективностью.

В условиях превращения литиевых производных ферроцена (1) исследовалась также возможность взаимодействия между литиевыми производными цимантрена $(\text{OC})_3\text{MnC}_5\text{H}_4\text{Li}$, полученных в условиях [3], как с циклопентаном, так и с циклогексаном (2). При этом обнаружено, что продуктами реакции в зависимости от температуры процесса являются либо литийкарбонилатные соли, как в случае ферроцена, либо соответствующие продукты присоединения цимонтренилциклопентила (циклогексил), либо же смеси карбеновых металлокомплексов [4].

Однако, в случае смешанного растворителя (гексан: ТГФ=1:1) и при температуре $0 - 10^\circ\text{C}$ реакция протекает, с высокой селективностью и может служить в качестве оптимальной рецептуры для препаративного получения монолитийферроцена.

Так, например, реакция (2) при минусовой температуре ($-10 \div -20^\circ\text{C}$) независимо от природы циклического кетона приводит к продуктам присоединения IIIa и IVa, которые при нейтрализации превращаются в соответствующие карбинольные производные III, IV.



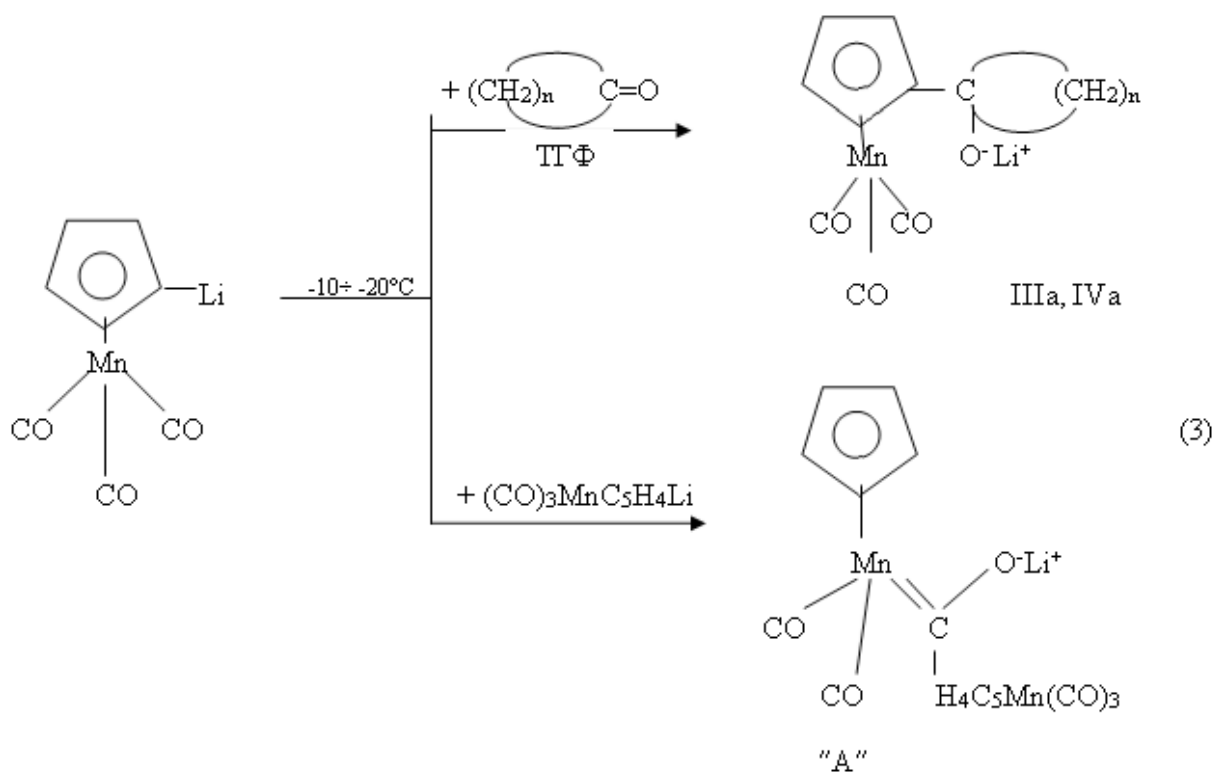
где $n=4$, IIIa, III; $n=5$, IVa, IV

Однако, если проводить эту реакцию в температурном интервале ($10 \div 40^\circ\text{C}$), то ее продуктами (3) являются небольшие количества (8–10%) IIIa, IVa, а остальное, согласно данным [5], является карбеновым комплексом Фишера (A) достаточно сложного строения.

Следовательно, в этих условиях, с участием молекул $(\text{OC})_3\text{MnC}_5\text{H}_4\text{Li}$ происходит межмолекулярное взаимодействие одной из терминальных карбонильных групп (CO) с молекулой сореагента.

Как известно, в условиях (2) литиевые производные цимантрена $(\text{OC})_3\text{MnC}_5\text{H}_4\text{Li}$ с ацетил- и формилцимантrenom $(\text{OC})_3\text{MnC}_5\text{H}_4\text{COCH}_3$ [5] и $(\text{OC})_3\text{MnC}_5\text{H}_4\text{CHO}$ [5] образуют с достаточно высоким выходом, соответствующие гомобидерных карбинольных металлокомплексов: $[(\text{OC})_3\text{MnC}_5\text{H}_4]_2\text{C}(\text{R})\text{OH}$ (где $\text{R}=\text{H}, \text{CH}_3$) [5].

Поэтому направления протекания обеих рассматриваемых реакций тесно связаны со структурными особенностями циклических кетонов. Строение образующегося в ходе этих реакций в температурном интервале (-10 ÷ -20°C) карбен-ового комплекса "А" было доказано косвенно, методами ЯМР ¹H и ИК-спектроскопии в дейтерированном тетрагидрофуране (C₄D₈O).



Таким образом, синтез карбинольных производных ферроцена и цимантрена в условиях реакций (1) и (2) представляет нам препаративно не выгодным, многостадийным процессом, причем выделение из реакционной смеси целевых продуктов с высокой степенью чистоты связано со многими техническими сложностями.

В связи с данным обстоятельством возник вопрос о разработке одностадийного и более удобного метода синтеза циклических карбинольных производных ферроцена и цимантрена.

С учетом упомянутых выше особенностей протекания реакций направленных на получение соединений I–IV по схемам (1) и (2) представляет важный научно-практический интерес их осуществление в условиях межфазного катализа. В качестве нерастворимых друг в друге фазообразователей были использованы вода (неорганический фазообразователь) и петролейный эфир (органический фазообразователь).

В органическую фазу вводятся реагирующие компоненты — ферроцен (цимантрен) и циклические кетоны, а в неорганическую фазу катализатор (H₂SO₄) и переносчик катализатора из неорганической фазы в органическую. Как было установлено ранее [4], из-за низкого значения рК=10–11, присоединение ферроцена к кетонам и альдегидам происходит только в условиях высокой кислотности. При подборе оптимальных условий для присоединения ферроцена (цимантрена) к циклическим кетонам, следует учесть не только соотношение органической фазы к неорганической (10:1), но и соотношение катализатора как взаимодействующим кетонам (1:1), так и переносчикам диэтиламинонафтенатной четвертичной соли (DEANaf). В нашем случае соотношение четвертичной аммониевой соли к катализатору было взято (1:10).

Результаты присоединения ферроцена и цимантрена к циклическим кетонам в условиях межфазного катализа проведены ниже.

Фаза	Фазообразующие компоненты	Соотношение компонентов	Реагирующие компоненты	Продукты присоединения
органическая	петролейный эфир	10	ферроцен (цимантрен) и циклопентанон (циклогексанон)	ферроценил (цимантренил) циклопентил (циклогексил) карбинолы
неорганическая	вода	1	катализатор H ₂ SO ₄ и его переносчик (C ₂ H ₅) ₂ (H) ⁺ NOOCNaf	катализатор H ₂ SO ₄ и его переносчик (C ₂ H ₅) ₂ (H) ⁺ NOOCNaf

Оказалось, что в случае ферроцена, реакция присоединения к циклическим кетонам в предлагаемых условиях межфазного катализа начинается сразу же после введения переносчика DEANaf [3,4].

При повышении температуры от комнатной (20°C) до 40°C продукты присоединения — ферроциклопентил (циклогексил) металлоорганические (карбинольные) производные переходят в органическую фазу, и выделение их становится не сложной процедурой. Выход ферроциклопентилкарбинольных производных I и II по ферроцену по этому методу составляло 87–91 %.

Однако, проведение реакции окислалкилирования цимантрена с участием этих циклических кетонов в тех же условиях, что и ферроцена, приводит к частичному разрушению исходного металлокомплекса. Поэтому эту и подобные ей реакции следует проводить при более низких (-10÷ -20°C) температурах. Вывод III–IV цимантренилметаллоорганических (карбинольных) производных по цимантренилу находился при этом в пределах 70–74 %.

Образующиеся в ходе реакции целевые продукты, такие, как ферроциклопентил-, циклопентил- (циклогексил) карбинольные соединения (I и II), а также цимантренил-циклопентил (циклогексил) карбинольные производные (III и IV) из реакционной смеси были выделены следующим образом: сначала реакционный раствор упаривался досуха, а затем, остаток экстрагировался изопропиловым спиртом для выделения I–IV производных.

Методом микроанализа был установлен элементный состав карбинольных металлокомплексов, который соответствовал формулам: $C_{15}H_{18}FeO$ (I); $C_{16}H_{20}FeO$ (II); $C_{13}H_{13}MnO_4$ (III); $C_{14}H_{15}MnO_4$ (IV).

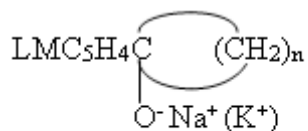
Оказалось, что карбинольные производные ферроцена (I и II) являются низкоплавкими соединениями с $T_{пл}$ 68–71°C (I) и $T_{пл}$ 58–60°C (II).

Что же касается карбинольных производных цимантрена (III и IV) то они оказались жидкими продуктами с относительной плотностью $d^{20} = 1.267$ г/см³ (IV).

Установлено, что как производные ферроцена (I, II), так и производные цимантрена (III, IV) на открытом воздухе не гидролизуются и не окисляются.

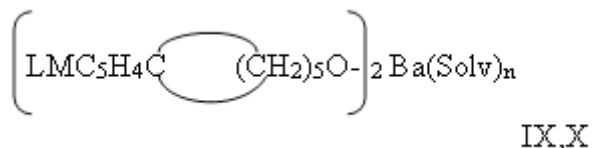
Изучение реакционной способности полученных соединений (I–IV) показало, что в отличие от линейных и изоструктурных карбинольных производных ферроцена и цимантрена $LMC_5H_4C(R_1R_2)OH$ [6, в присутствии каталитических количеств, например, метричные эфирные производные. Однако в этих условиях, с органическими кислотами по-видимому, из-за стерических факторов, не образуются каких-либо сложно эфирных производных (I–IV).

Тем не менее, производные I–IV, вступая в обменную реакцию при pH=8–9 с Na (K) OH, образуют соответствующие алкоголяты этих металлов, V–VIII.



V-VIII

А их реакции в водно-спиртовой среде с Ba (OH)₂ приводит, с очень низким выходом, к сольватному алкоголяту бария IX–X:

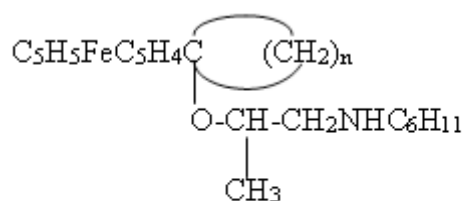


LM=C₅H₅Fe, IX; LM=(OC)₃Mn, X; Solv=H₂O, ТГФ, ROH, n=2–4.

При этом обнаружено, что как натриевые (калиевые) V–VIII, так и бариевые алкоголяты IX–X представляют собой порошки изменяющие цвет от бледно синего до темно синего, хорошо растворяющиеся в теплой воде, умеренно в спиртах, а бариевые сольватные алкоголяты — в различных марках бензина.

Они не характеризуются четкими температурами плавления, так как производные V–VIII разлагаются при температуре выше 180°C, а производные IX–X, разлагаются при температуре свыше 205°C [6].

На примере ферроциклогексил (циклопентил) металлоорганических (карбинольных) производных (I) и (II) были изучены реакции с хиральными центрами. Так, на базе N, N — циклогексил- (2-гидрокси) пропиламина в кипящем ДМФО в присутствии H₂SO₄ — катализатора были получены соответствующие эфирные производные ферроцена (XI–XII):



XI-XII

n=4 (XI); n=5 (XII).

Производные XI и XII оказались темно-коричневого цвета жидкостями

XI — $T_{\text{кип}}=186-188^\circ\text{C}$, $d^{20}=1.467 \text{ г/см}^3$ XII — $T_{\text{кип}}=162-164^\circ\text{C}$, $d^{20}=1.4283 \text{ г/см}^3$, ЯМР

^1H — спектр (в CDCl_3): $\delta_{\text{C}_5\text{H}_4(\alpha, \beta)}=3.872; 3.913; 3.982, 4.061 \text{ м. д.}$; $\delta_{\text{C}_5\text{H}_5}=4.10 \text{ м. д.}$

Строение полученных металлоорганических (карбинольных) производных ферроцена и цимантрена изучалось с помощью ИК и ЯМР ^1H спектральных методов.

Обнаружено, что ИК-спектральная полоса поглощения карбинольными группами в исходных соединениях для циклопентанона составляет $\nu_{\text{C=O}} 1678 \text{ см}^{-1}$, а для циклогексанона $\nu_{\text{C=O}} 1690 \text{ см}^{-1}$. В результате присоединения ферроцена и цимантрена в этих циклических кетонах наблюдались полосы поглощения карбинольных групп для ферроценильных производных (I, II) в области $\nu_{\text{OH}} 3420-2485 \text{ см}^{-1}$, а для цимантренильных производных (III, IV) в области $\nu_{\text{OH}} 3390-3445 \text{ см}^{-1}$. Причем, независимо от природы металлоорганического остатка наблюдаемые полосы находятся в области $\nu_{\text{OH}} 3420-3435 \text{ см}^{-1}$ и $\nu_{\text{OH}} 3448-3485 \text{ см}^{-1}$; для производных III, IV подобные полосы находятся в области $\nu_{\text{OH}} 3395-3412 \text{ см}^{-1}$ и $\nu_{\text{OH}} 3415-3445 \text{ см}^{-1}$. Согласно [5], полосы поглощения, находящиеся в более высокочастотной области спектра, следует отнести к валентным колебаниям свободных OH групп, а полосы, проявляющиеся в виде умеренных рефлексов и находящихся в высокочастотной области спектра — к валентным колебаниям OH групп координационных атомами Fe и Mn [5].

ЯМР ^1H спектры для (I–IV) производных сняты в CCl_4 при комнатной температуре, на приборе «Bruker-WP-200SY» показали, что введение как циклопентилкарбонильных, так и циклогексилкарбонильных заместителей в ЦПД кольцо приводит к расщеплению α и β протонов ЦПД кольца, не зависимо от природы металлоорганического радикала. Так, например, в ЯМР ^1H спектре у ферроцилциклопентил (циклогексил-) карбинольных производных (I, II) — введение к ЦПД кольцо как циклопентилкарбинольных (I), так и циклогексилкарбинольных (II) заместителей приводит не только к расщеплению α и β — протонов замещенного ЦПД кольца, но и наблюдаемые сигналы появляются в виде двух триплетов. При этом, химические сдвиги этих сигналов для производных (I) составляют $\delta_{\text{C}_5\text{H}_4(\alpha, \beta)}=3.82$ и 3.91 м. д. , а сигналы протонов от незамещенного ЦПД кольца наблюдаются при $\delta_{\text{C}_5\text{H}_4}=4.12 \text{ м. д.}$ Для производных (II) химические сдвиги от протонов замещенного ЦПД кольца наблюдается при $\delta_{\text{C}_5\text{H}_4(\alpha, \beta)}=3.88$ и 3.97 м. д. , а для незамещенного — при $\delta_{\text{C}_5\text{H}_4}=4.12 \text{ м. д.}$, которые не зависимо от природы заместителей, в ЦПД кольцо практически не изменяются.

Что касается ЯМР ^1H спектров производных III и IV, то они по своему расположению и характеру очень похожи на спектры производных I и II. При введении вышеуказанных карбинольных заместителей в ЦПД кольцо цимантрена (химические сдвиги протонов незамещенного ЦПД кольца находится при $\delta_{\text{C}_5\text{H}_5}=5.14 \text{ м. д.}$) наблюдается расщепление α и β протонов, которое для соединения (III) арактеризуются химическими сдвигами, находящимися при $\delta_{\text{C}_5\text{H}_4(\alpha, \beta)}=4.68$ и 4.92 м. д. , а для IV при $\delta_{\text{C}_5\text{H}_4(\alpha, \beta)}=4.62$ и 4.89 м. д. [6]. Установленные химические сдвиги от протонов (α и β протонов) замещенного ЦПД кольца в ЯМР ^1H спектрах для производных I–IV, однозначно показывает, что карбинольные остатки введенные в ЦПД кольцо проявляют сильно электродонорные свойства [7].

Литература:

1. Сулейман, Г.З., Литвишков Ю.Н., Кадырова Э.М., Рустамов М.И. и др. //Изв. Вузов. РФ. Химия и химическая технология. Иваново. 2005. Т. 48. Вып. 12. с. 73–76.
2. Велиев, Р.А., Кадырова Э.М., Курбанов З.Г., Сулейман Г.З. //Изв. Вузов, Химия и химическая технология. 2010. Т. 53. Вып. 1. с. 70–74.
3. Перевалова, Э. Г, Решетова О.А., Грандберг К.И. Методы элементоорганической химии. Ферроцен. М: Наука. 1983. 498 с.
4. Несмеянов, А.Н., Перевалова Э.Г., Тюрин Э.Д. и др. Электрофильное замещение в ряду ферроцена // Изв. АН СССР. Сер. хим. 1976, №9, с. 178.
5. Гинзбург, А. Г Химия π -циклопентадленильных комплексов марганца. Итоги науки и техники ВИНТИ, сер. Координационная химия. Металлоорганическая химия. 1990. Т. 2. с. 1–160.
6. Сыркин, В.Г. Карбинолы металлов. М.: Химия, 1992, 238с.
7. Сулейман, Г.З., Литвишков Ю.Н., Кадырова Э.М. //Азерб. хим. журн. 2006. №1. с. 37–42.

Характеристика сетчатой структуры сополимеров акрилонитрила с гексагидро-1,3,5-триакрилтриазином

Исмоилова Халоват Джабборовна, кандидат сельскохозяйственных наук, преподаватель;
Бозорова Найима Худойбердиевна, кандидат химических наук
Каршинский инженерно-экономический институт (Узбекистан)

Исследования по усовершенствованию методов синтеза ионообменных сорбентов с пористой структурой на основе сополимеров являются актуальными.

Целью настоящей работы является получение ионообменных гранулированных сорбентов на основе сополимеров акрилонитрила с многофункциональным сшивающим агентом — гексагидро-1,3,5-триакрилтриазином путем их химических превращений и изучение их сетчатой структуры.

Characteristic of the reticular structure of the copolymers of acrylonitrile s hexahydro –1,3,5-triakrililtriazinom

Research on improving methods for the synthesis of ion-exchange sorbents with a porous structure based on copolymers is relevant.

The aim of this work is to obtain granular ion exchange sorbents based on acrylonitrile copolymers with multifunctional crosslinking agent — hexahydro-1,3,5-triakrililtriazinom by their chemical transformations and the study of their network structure.

Полимеры и материалы на их основе занимают очень важное место в нашей жизни, их производство из года в год увеличивается большими темпами, синтезируются новые полимеры, изобретаются новые материалы. В этом отношении важнейшим направлением является синтез и изучение структуры ионообменных материалов с заданными свойствами, которые находят широкое применение в различных областях народного хозяйства и что важно в решении проблем экологии и охраны окружающей среды. Поэтому получение ионитов на основе акрилонитрила путем гранулярной полимеризации в присутствии сшивающего агента с последующим химическим модифицированием функциональных групп является актуальным.

Сополимеры акрилонитрила со сшивающими агентами различной структуры стали за последнее время наиболее распространенными каркасами для синтеза ионообменников. От каркасов другого химического состава они отличаются возможностью контролировать степень сшивки и доступностью для различных химических реакций.

Подобные полимеры — иониты давно применяются в различных сорбционных технологиях, требующих особую механическую и химическую стойкость, когда необходимо концентрировать технологические растворы для извлечения из них особо ценных компонентов, очищать источники водоснабжения, сточных промышленных вод от токсических ионов и экологически опасных соединений.

В связи с этим исследования по усовершенствованию методов синтеза ионообменных сорбентов с пористой структурой на основе вышеназванных и других сополимеров являются актуальными.

Целью настоящей выпускной работы является получение ионообменных гранулированных сорбентов на основе сополимеров акрилонитрила с многофункциональным сшивающим агентом — гексагидро-1,3,5-триакрилтриазином путем их химических превращений и изучение их сетчатой структуры.

Физико-химические характеристики и сорбционные свойства полученных сополимеров зависят от структуры макроцепи, природы функциональных групп полученных анионитов и т. д. Но сетчатая структура сополимеров акрилонитрила с гексагидро-1,3,5-триакрилтриазином осталось не охарактеризованной. Поэтому было интересно изучить процесс сополимеризации акрилонитрила со сшивающим агентом гексагидро-1,3,5-триакрилтриазином, содержащим в своей структуре три виниловых групп.

Сополимеризацию осуществляли суспензионным методом в присутствии динитрил-азо-изомасляной кислоты в качестве инициатора (до 1 масс. % от массы смеси мономеров), стабилизатор-водорастворимый крахмал, при температуре 343 К в среде насыщенного водного раствора NaCl (дисперсионная среда), полученного при комнатной температуры, при скорости вращения 450–500 об/мин; продолжительность реакции до 5 часов.

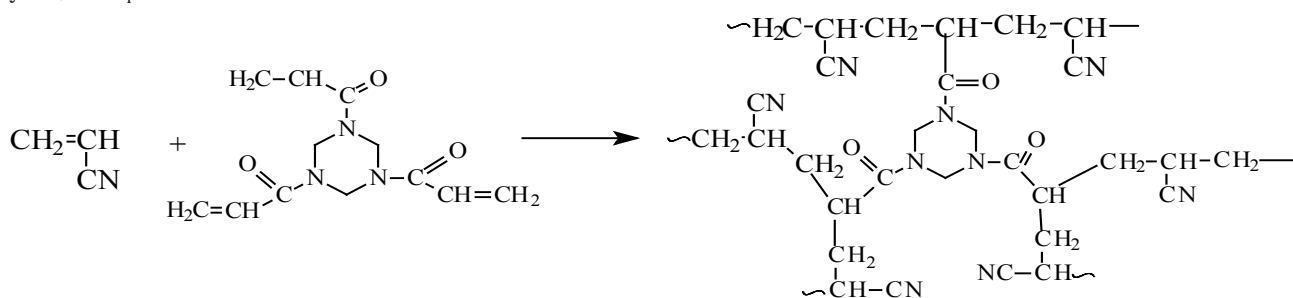
Соотношение мономеров и порообразователя толуола, в которой растворен инициатор и дисперсионной средой равнялось 1:4 (водный модуль). Для получения пористой структуры использовали инертный растворитель толуол в количестве

30% от массы смеси мономеров. В качестве защитного коллоида применяли 1%-ный водный раствор крахмала. Необходимое количество инициатора, АН, ГТТ, стабилизатора, порообразователя вводили в реактор, снабженный механической мешалкой, холодильником и предварительно помещенный в термостат с начальной температурой для проведения сополимеризации. После окончания реакции реактор вынимали из термостата и проводили декантацию образцов.

Как известно, суспензионная сополимеризация проходит в гетерофазных условиях. Сополимеризация идет в каплях мономера и образующийся сополимер не растворим в собственном мономере и водно-органической среде.

Гранулированный сополимер не растворяется в растворителях полиакрилонитрила, что свидетельствует о наличии сшитой структуры.

Структуру образовавшегося сополимера между реагирующими компонентами можно схематически иллюстрировать следующим образом:



Таким образом был получен сополимер с исходными компонентами: АН: ГТТ=97,5; 2,5; 97:3; 95:5 масс %.

Плотность сополимеров — определяли пикнометрическим методом. Для определения плотности сополимера изучали плотность воды при 293К для сравнения с плотностью сополимера при той же температуре. Взвесив сухой пикнометр с погрешностью не более 0,0002 г, заполняли его до метки водой, закрывали стеклянной пробкой и погружали в водяную баню с температурой 293К на 30 мин. После этого точно устанавливали уровень воды в пикнометре до метки.

Закрыв пробкой и тщательно вытерев пикнометр снаружи производили второе взвешивание. После этого выливали воду из пикнометра, высушив его, охлаждали в эксикаторе и помещали несколько кусочков испытуемого сополимера. Закрыв крышкой, производили третье взвешивание. Далее доводили уровень воды в пикнометре до метки, закрывали и погружали в водяную баню с 293К на 30 мин. Затем доводили уровень воды до метки, тщательно отбирали воду снаружи и производили четвертое взвешивание.

Плотность сополимера определяли по формуле:

$$\rho = \frac{m_2 - m_0}{(m_1 - m_0) - (m_3 - m_2)}$$

где m_0 — масса пикнометра, г;

m_1 — масса пикнометра с водой, г;

m_2 — масса пикнометра с сополимером, г;

m_3 — масса пикнометра с водой и сополимером, г;

Набухание сополимеров — определяли гравиметрическим методом. Навеску образца помещали в бюкс, содержащего 5 см³ соответствующей жидкости. Бюкс герметично закрывали, помещали в центрифугу, выдерживали 5 минут при скорости 3000 об/мин, затем вынимали из центрифуги, бюкс пинцетом освобождали от образца, излишки растворителя удаляли фильтровальной бумагой и взвешивали на весах с точностью до 4-го знака.

После взвешивания набухший образец снова помещали в бюкс с растворителем. Действия повторяли через 5, 10 и 15 мин. и далее выдержки.

Измерения прекращали, когда различие в массах трех последних измерений не превышает 3 мг.

Степень набухания для каждого значения времени рассчитывали по следующей формуле:

$$\alpha_{(\tau)} = \frac{m_{(\tau)} - m_0}{m_0}$$

где $\alpha_{(\tau)}$ — степень набухания образца для фиксированного значения времени;

$m_{(\tau)}$ — масса набухшего образца для фиксированного значения времени;

m_0 — масса исходного вещества.

Коэффициент набухания q_{2m} рассчитывали по следующей формуле:

$$q_{2m} = \frac{g_{2m} - g_2}{g_2} \cdot \frac{\rho_2}{\rho_0} + 1;$$

где g_2 — навеска сухого сшитого полимера; g_{2m} — навеска набухшего сшитого полимера; ρ_2 и ρ_0 — плотности полимера и растворителя соответственно. Индекс m показывает, что данный параметр измерен в состоянии равновесного набухания. Степень набухания образцов изучена методом центрифугирования.

Расчет параметров сетки

Среднечисловую молекулярную массу сегментов цепи между узлами сшивания (M_c) и концентрацию цепей в сополимере (n_c), характеризующих плотность поперечного сшивания, рассчитали по предложенному в работе [39] уравнению:

$$M_c = \frac{\rho_2 V_1 \left[(q_{2m} + 1)^{-1} - \frac{1}{2} (q_{2m} + 1)^{-1} \right]}{\ln \left(\frac{1}{q_{2m} + 1} \right) - (q_{2m} + 1)^{-1} - \chi_1 (q_{2m} + 1)^{-2}}$$

где ρ_2 — плотность полимера; q_{2m} — константа набухания; V_1 — молярный объем растворителя; χ_1 — параметр Хаггинса (для системы полиакрилонирол-ДМФА принято равным 0,29).

Параметры сетки рассчитали, используя найденные значения среднечисловой молекулярной массы (M_c) активной цепи и плотности полимера по следующей формуле:

где v_c — число молей активных цепей в образце, моль; n_c — число молей активных цепей в единице объема сшитого сополимера, моль/см³; N_c — концентрация активных цепей в единице объема сшитого полимера (см³)⁻¹; N_A — число Авогадро; V_c — эффективный мольный объем активной цепи, см³/моль; V_2 — объем полимера, см³.

Литература:

1. Иониты и ионный обмен. Сборник статей под ред. Самсонова Г.В., Л, Наука, 1975, с. 5–10.
2. Сайدل М., Мамински Я., Душек К., Ионообменные каркасы с пористой структурой на основе сополимеров стирола с дивинилбензолом. Пластмассы, 1963, № 12 с. 7.
3. Энциклопедия полимеров. М, С. Э., т 1, с 998.
4. Пат. 96740 СРР, МКИ4С 08 F 12/36, С 08 F 20/26. Способ получения сшитого сополимера с пористой структурой/Поинеску П. И. (ЧССР). — № 54–10357; заявл. 25.12.65; опубл. 4.05.79.
5. Ли Я., Шенг Ф. Синтез и изучение сетчатых хелатных полимеров на основе акрилонитрила. II. Изучение с помощью ИК-спектроскопии сетчатых полимеров на основе акрилонитрила. // Acta Polym. Sci. — 1990. — № 5. — с. 618–622.
6. Йокота Кадзуаки, Томинага Макото, Таката Йосиюки. Соплимеризация акрилонитрила с b-стиролсульфонатом натрия и b-стиролсульфонамидом. // Хоккайдо дайгакукогакубукэнкюококу, Bull. Fac. Eng. Hokkaido Univ. — 1968. — № 47. — с. 131–140.
7. Трубицина С.И., Исмаилов И., Аскарлов М.А. Соплимеризация акрилонитрила с рядом мономеров под действием иницирующей системы азотсодержащий мономер-пересульфат калия. // Высокомолек. соед. — 1977. — А19. — № 3. — с. 495–499.

Потенциометрическое титрование Cu (II) раствором ЭДТА

Кутлимуротова Нигора Хакимовна, кандидат химических наук, старший преподаватель;

Мустафакулова Лола Обилкосим кизи;

Турдикулов Ислом Хаитбой угли;

Жумартова Улбозор Убайдуллаевна, студент

Национальный университет Узбекистана имени Мирзо Улугбека (г. Ташкент)

Показана возможность и оптимизированы условия потенциометрического титрования Cu (II) в водах.

Ключевая слова: потенциометрия, электроды, ток, потенциал, буфер, реагент.

Введение. Важность Cu (II) в науке, технике, промышленности и народном хозяйстве огромна, поскольку она обладает уникальными свойствами и оригинальными характеристиками.

В последнее время в потенциометрическом титровании в качестве титрующих реагентов применяется антрахиноновая кислота, нашедшая применение в быту, экологии и различных областях народного хозяйства, особенно

в медицине, химии и парфюмерии. Как известно антралиловая кислота специфична к ионам меди, поэтому важно получение органических комплексообразующих веществ, на основе доступных, импортзамещающих и дешевых компонентов, обладающих рядом ценных аналитических свойств с целью их использования в качестве подходящих и селективных реагентов на ион меди.

Учитывая все преимущества и достоинства Cu (II) и его соединений, а также важность меди в народном хозяйстве возникла необходимость установления их макро-, микро- и следовых концентраций в природных объектах и промышленных материалах, поскольку их микроколичества порою играют важную и определяющую роль в решении различных аналитических, медицинских, экологических, технических, народно-хозяйственных и других задач.

Потенциометрический метод анализа основан на зависимости равновесного электродного потенциала (E) от активности (a) или концентрации (C) определяемого вещества в растворе. Для измерений необходимо составить гальванический элемент из подходящего индикаторного электрода и электрода сравнения, а также иметь прибор для измерения потенциала индикаторного электрода, в качестве которого используют:

— потенциометр (для общих и особо точных измерений);

— электронные вольтметры, рН-метры, иономеры — современные потенциометры заводского типа с электронными усилителями тока.

Результаты и их обсуждение

Влияние природы и концентрации фонового электролита. Ввиду того, что кислотнo-основные свойства и концентрация фонового электролита оказывает весьма существенное влияние на ход, условия и результаты потенциометрического титрования иона меди, то установление влияния его природы и содержания было необходимо в первую очередь.

Условия титрования, проводившихся с этой целью, были следующими: в зависимости от природы фона, объем исследуемого раствора — 20,0 мл; температура 18–20°C; концентрация титранта 0,01 М.

Эксперименты показали, что при потенциометрическом титровании иона меди получают комплексы состава $\text{Me}:\text{Реагент}=1:1$. Достаточно хорошо соблюдается пропорциональность между взятыми количеством металла и затраченными объемами реагентов в точке эквивалентности

Как уже отмечалось, ионы благородных, а также тяжелых металлов относятся к числу катионов, образующих весьма прочные комплексные соединения с антралиловой кислотой, поэтому необходимо было прежде всего проверить возможность потенциометрического титрования иона меди.

Для получения только первичных дитизонатов исследуемых металлов были проведены титрования вышеуказанных катионов в более кислых растворах, полученных при замене ацетата калия на перхлорат лития, а также с добавлением к последнему (до $2 \cdot 10^{-3}\text{M}$) хлорной кислоты.

Cu (II) достаточно хорошо титруются при использовании антралиловой кислоты, как на фонах ацетатов калия и аммония, так и на фоне перхлората лития, а также в растворах, содержащих кроме перхлората лития одновременно и свободную хлорную кислоту при ее концентрациях, не превышающих 0,005 М. Кривые титрования ионов этих металлов имеют нормальную восходящую форму с горизонтальной левой и круто восходящей правой ветвями. Положение точки эквивалентности хорошо совпадает с точкой, в которой молярное соотношение $\text{Me}:\text{PK}=1:1$. Титруемый раствор палладия при этом приобретает красновато-коричневую, а меди (II) — зеленоватую окраску. Причем, если концентрация палладия (II) превышает $2,10^{-5}\text{M}$, то раствор сначала мутнеет, а затем наблюдается выпадение красно-коричневого осадка.

Результаты амперометрического титрования различных количеств Cu (I) раствором ДТЗ, а также меди (II) и палладия (II) раствором РК в различных фоновых электролитах свидетельствует о правильности и воспроизводимости разработанных методик.

Таким образом, оптимальной концентрацией фона в исследуемом растворе при проведении титрования ионов металлов следует считать область от 0,1 до 0,3 М.

Заключение. Таким образом, метрологические характеристики потенциометрического титрования меди раствором антралиловой кислоты на различных по природе фоновых электролитах при оптимизированных условиях свидетельствуют о высокой точности предлагаемых методик. При этом обнаружены весьма достоверные, надежные, правильные и воспроизводимые результаты, а между введенными и найденными количествами иона меди ($t_{0,95}$) расхождений не обнаружено. Нижняя граница (C_{H}) определяемых содержаний металлов в 20,0 мл анализируемого раствора составляет 3,2 мкг в зависимости от природы титруемых металлов.

Литература:

1. Лурье, Ю. Ю. Справочник по аналитической химии. М.: Химия. 1989. с. 267–275.
2. Геворгян, А. М., Яхшиева З. З., Алламбергенов Б. А. Амперометрическое титрование платины, палладия и золота раствором тиацетамида. Фармац. журн. 2010. №2. с. 32–35.
3. Геворгян, А. М., Яхшиева З. З. Оптимизация условий амперометрического определения некоторых благородных металлов раствором тиацетамида. //Журн. Хим. пром. Санк-Петербург. 2010. Т. 87. №2. с. 85–88.
4. Москвин, Л. Н., Царицына Л. Г. Методы разделения и концентрирования в аналитической химии. М. Химия. 1991. 234. с.

5. Байзер, М. М. Электрохимия органических соединений. / М.; Мир. 1976. 728 с.
6. Геворгян, А. М., Талипов Ш. Т., Хадеев В. А., Мирзоян И. И. Вольтамперные кривые окисления тионалида на платиновом микроаноме в ледяной уксусной кислоте. // Депонир. в ВИНТИ № 4616–81 от 24.09.81. с. 1–3.
7. Геворгян, А. М., Хадеев В. А., Талипов Ш. Т., Костылев В. С. Анодные вольтамперные кривые окисления тионалида на платиновом микроаноме в пропанол. // Узб. хим. журн. 1981. № 3. с. 22–24.
8. Геворгян, А. М., Талипов Ш. Т., Хадеев В. А., Мухамеджанова Д. В. Вольтамперометрическое поведение диэтилдитиокарбамина натрия на платиновом аноде в среде диметилформамида. // Журн. аналит. химии. 1980. Т. 35. № 10. с. 2026–2028.

Разработка метода ВЭЖХ для идентификации замещенных 1,2,4-триазинов

Роик Богдан Олегович, магистр;

Научный руководитель: Агеева Екатерина Владимировна, кандидат химических наук

Юго-Западный государственный университет (г. Курск)

Ключевые слова: высокоэффективная жидкостная хроматография, разработка методики ВЭЖХ, гетероциклические соединения, 1,2,4-триазины, пиразоло [5,1-с] [1,2,4] триазин.

Широкое использование высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) в научной и промышленной среде для разделения, обнаружения, количественного и качественного анализа соединений, а так же физико-химического исследования свойств различных классов веществ, в настоящее время является одним из наиболее перспективных методов в различных областях химических и биологических наук. Основой хроматографического разделения является участие различных компонентов разделяемой смеси (как сложной, так и простой) в системе межмолекулярных Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий на границе раздела фаз. ВЭЖХ, как особый способ анализа сложных исследуемых объектов, входит в состав группы методов, которые используют предварительное разделение исходной многокомпонентной смеси на относительно простые вещества [1].

Принцип хроматографического разделения, разработанный русским ученым М. С. Цветом в 1903 году, основан на способности различных веществ специфически адсорбироваться на сорбенте, заключенном в хроматографической колонке, под действием правильно выбранной по составу подвижной фазы — элюента. В современной хроматографии принцип разделения по-прежнему идентичный. В результате происходит разделение анализируемых веществ и их концентрирование в строго определенном слое адсорбента. Затем через колонку пропускают подходящие по составу элюенты, которые ослабляют силы адсорбции и выносят с током раствора индивидуальные вещества. Те, в свою очередь определяют детекторами в различных диапазонах длин волн и выводятся на монитор в виде пиков, соответствующих каждому из отдельных веществ. Отличительной особенностью ВЭЖХ является использование наиболее высокого давления (до 400 бар) и мелкозернистых сорбентов (обычно 3–5 мкм). Это позволяет разделять сложные смеси веществ

быстро и полно, затрачивая совсем не большое количество времени анализа от 3 до 30 минут [2].

Высокоэффективная жидкостная хроматография — является одним из самых информативных аналитических методов. Этот метод широко используется во всех развитых странах, но в сравнении с другими физико-химическими методами анализа, требует весьма высокой квалификации персонала, а стоимость одного анализа достигает нескольких десятков и даже сотен долларов США. Таким образом, упрощение самой процедуры хроматографического анализа и снижение его стоимости представляется важной задачей, а разработка оптимальных параметров хроматографирования, включая создание метода и условий для идентификации и обнаружения, вновь синтезированных веществ, является актуальной задачей.

Чаще всего, специалист в области хроматографии, который занимается разработкой методики ВЭЖХ для обнаружения и анализа особого класса веществ, сталкивается с определенными трудностями. Обуславливается это выбором оптимальных параметров хроматографической системы и условий элюирования. Таким образом, в основу создания методики ВЭЖХ входит: выбор детектора, правильной ВЭЖХ колонки и ее формата, выбор подвижной фазы — растворителя и буфера, режима элюирования, а так же применение валидации, для определения воспроизводимости разработанной методики.

При разработке методики ВЭЖХ наиболее удобна и применима структура оформления методов хроматографии по рекомендациям СИРАС/4105/R, сочетающая в себе простоту оформления и информационную насыщенность [3].

Данная структура представлена следующим образом:

— Область применения методики. Структурные формулы целевых веществ.

— Краткое описание методики. Приготовление стандартных растворов.

- Химические реагенты и материалы.
 - Оборудование и условия хроматографирования.
- Общий вид хроматограммы.
- Критерии пригодности хроматографической системы.
 - Требования к параметрам пика (ов) для проведения количественного определения. Проведение количественного определения.
 - Основные валидационные характеристики. Рекомендации по проведению валидации.
 - Ссылки на нормативные документы и литературные источники.

В нашей работе данная структура оформления методики используется не в полном объеме. Связано это с отсутствием углубленных данных, которые находятся в стадии расчета.

Структура оформления методики очень удобна для химика-аналитика, которому необходимо эту методику воспроизвести [4].

Цели и задачи исследования

Главной целью исследования является разработка оптимальных параметров и условий идентификации гетероциклических соединений, а именно замещенных 1,2,4 — триазинов методом ВЭЖХ, а так же хроматографическое исследование синтезированного органического соединения 7-амино-3-*трет*-бутилпиразоло [5,1-*с*] [1,2,4] триазин-4(6*H*)-она (2) и создание методики определения с применением ОФ-ВЭЖХ-УФ системы.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

- необходимо произвести сбор информации о веществе и о методе исследования, а так же более подробно изучить литературные данные;
- провести ряд дополнительных и вспомогательных исследований данного вещества, а именно ИК-спектрометрию и Уф-спектроскопию;
- провести ряд экспериментальных исследований направленных на разработку оптимальных параметров и условий идентификации вещества методом ВЭЖХ.

Гетероциклические соединения — самая распространенная группа органических соединений, содержащих в своем цикле не только атомы углерода, но и атомы других элементов (гетероатомы). Гетероциклические соединения играют важнейшую роль в процессах метаболизма, а так же обладают высокой биологической активностью. Большая часть современных лекарственных веществ содержит в своей структуре гетероциклы. Они входят в состав многих веществ природного происхождения, таких как нуклеиновые кислоты, хлорофилл, гемоглобин крови, алкалоиды, пенициллины, многие витамины, гербициды и пестициды, гормональные препараты др.

Экспериментальная часть исследования

Исследуемое нами вещество относится к конденсированным гетероциклическим соединениям состоящее из триазинового и пиразольного колец (рисунок 1).

Представленное на рисунке 1 гетероциклическое соединение было получено синтезом из 7-амино-3-*трет*-бутил-4-оксо-6*H*-пиразоло [5,1-*с*] [1,2,4] триазин-8- карбоновой кислоты (1) (рисунок 2) [5].

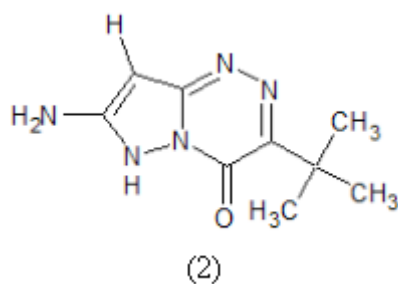


Рис. 1. Исследуемое вещество. Структурная формула 7-амино-3-трет-бутилпиразоло [5,1-*с*] [1,2,4]триазин-4(6*H*)-он

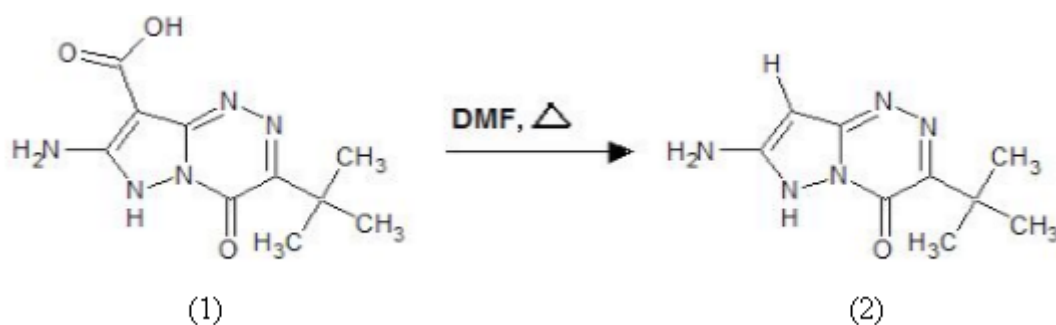


Рис. 2. Синтез 7-амино-3-трет-бутилпиразоло [5,1-*с*] [1,2,4]триазин-4(6*H*)-она

Полученный пиразоло [5,1-*c*] [1,2,4] триазин (2) представляет собой светло-розовый кристаллический порошок с молекулярной массой 207.21 г/моль, $T_{пл.} > 300^{\circ}\text{C}$. Элюент для хроматографии имеет состав: хлороформ 75%: метанол 25%.

В результате исследований были сняты спектры полученного вещества в УФ и ИК областях. Для УФ-спектроскопии использовали спектрофотометр фирмы SHIMADZU UV-1800. Были определены оптическая плотность и длина волны детектирования в пределах 190–400 нм. В УФ-спектре соединения (2) наблюдаются 3 максимума поглощения при 210 нм, 251 нм, 322 нм (рисунок 3).

Для снятия ИК-спектров использовали ИК-Фурье спектрометр фирмы Agilent Technologies Cary 600 Series FTIR Spectrometer. В ИК-спектре пиразоло [5,1-*c*] [1,2,4] триазина (2) валентное колебание аминогруппы располагается при 3298 см^{-1} . При 3463 см^{-1} располагается валентное колебание NH-группы, а при 1668 см^{-1} — валентное колебание карбонильной группы кислоты, при 1625 см^{-1} — карбонильной группы кольца (рисунок 4).

Все полученные данные о веществе позволили разработать наиболее оптимальные условия элюирования и параметры ВЭЖХ-системы.

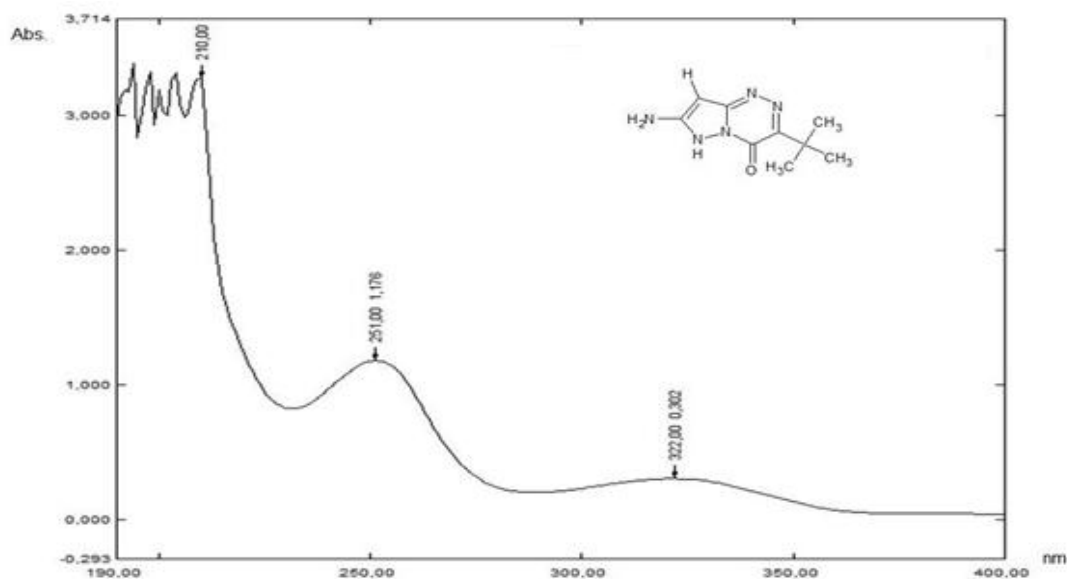


Рис. 3. УФ-спектр, полученный при исследовании 7-амино-3-трет-бутилпиразоло [5,1-*c*] [1,2,4] триазин-4(6H)-она

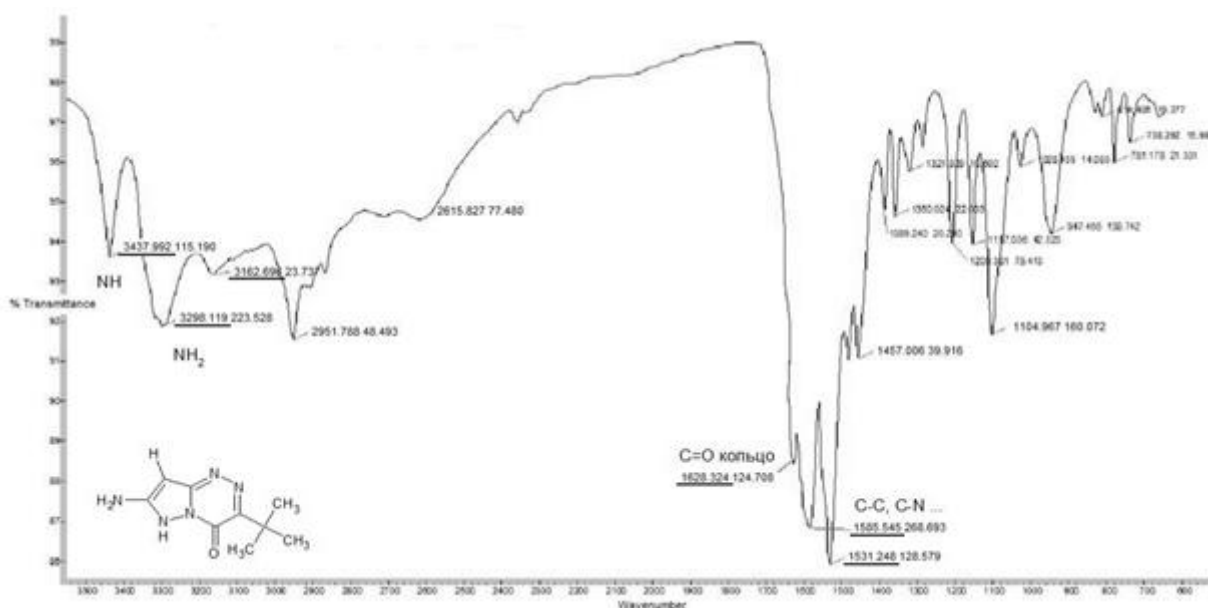


Рис. 4. ИК-спектры 7-амино-3-трет-бутилпиразоло [5,1-*c*] [1,2,4] триазин-4(6H)-она

Экспериментальные исследования проводили на высокоэффективном жидкостном хроматографе фирмы Agilent Technologies 1260 infinity с УФ-детектором, а так же с последующей компьютерной обработкой результатов в программе Open LAB ChemStation Workstation Revision C. 01.06 (ENG). Был изучен обращено-фазный вариант метода ВЭЖХ с применением колонки Agilent ZORBAX SB-C184.6x150мм, 5 мкм (PN 883975–902, SN VSCM039110, LN B14031), поскольку колонка рекомендовала себя ранее как относительно дешевая с улучшенной симметрией выхода пиков. В качестве подвижной фазы использовали смесь хлороформ: метанол, взятые в соотношении 75%: 25%.

Скорость потока была взята 1.000 мл/мин. Температура колонки — 40°C. Детектирование проводилось при длине волны 252.4 нм. Объем вводимой пробы — 30 мкл.

Так же, в ходе экспериментальной работы была разработана пооперационная схема технологии и последовательности действий, способствующих созданию методики идентификации исследуемого вещества методом ОФ-ВЭЖХ-УФ (рисунок 5). В начале исследований экспериментальным путем нами был определен растворитель для полученного вещества. Тем самым, был подобран конкретный состав и соотношение подвижной фазы.

Для градуировки ВЭЖХ-системы использовалось чистое синтезированное вещество как внешний стандартный образец. Для приготовления стандартных растворов, навеску вещества в количестве 0.05 грамм помещали в колбу на 50 мл и доводили метанолом до метки. Полученный ос-

новной раствор с концентрацией 1.000 мкг/см³ использовали для приготовления рабочих растворов с концентрациями 0.1 мкг/см³, 0.01 мкг/см³, 0.001 мкг/см³, 0.0001 мкг/см³.

Перед калибровкой, вводили пробу с наибольшей концентрацией, для точно определения времени удерживания и идентификации вещества.

Калибровку, непосредственно начинали с меньшей концентрации. Вводимую пробу пропускали через мембранный фильтр.

Градуировка прибора проводилась по стандартной схеме, используя методы и знания хроматографического анализа.

Хроматограммы исследуемых калибровочных растворов с разными концентрациями представлены на рисунках 6–10.

Так же, пятой точкой для идентификации вещества послужила наибольшая концентрация основного раствора равная 1 мкг/см³. Необходимо было с точностью определить отсутствие, каких-либо второстепенных пиков системы или примесей растворителя (метанола) при большой концентрации раствора.

Специфичность методики

При проведении исследования установлено, что время удерживания 7-амино-3-*тет*-бутилпирозоло [5,1-*c*] [1,2,4]триазин-4(6*H*)-она с концентрацией 1 мкг/см³ составляет 1.411 мин (рисунок 11). На общей хроматограмме видно, что вещество идентифицировалось как индивидуальное, и пики примесей из растворителя не мешают его определению.



Рис. 5. Пооперационная схема технологии проведения эксперимента, способствующего созданию методики идентификации исследуемого вещества методом ОФ-ВЭЖХ-УФ

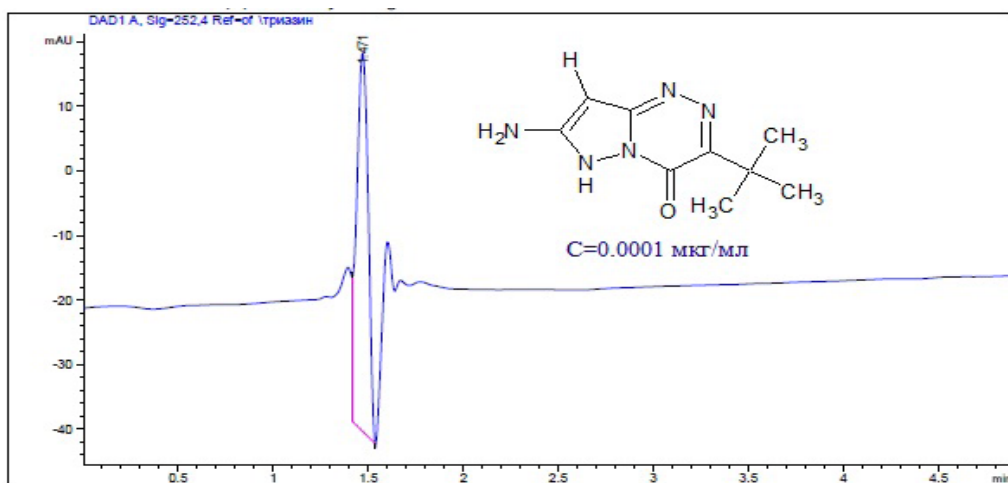


Рис. 6. Концентрация раствора 0.0001 мкг/см³

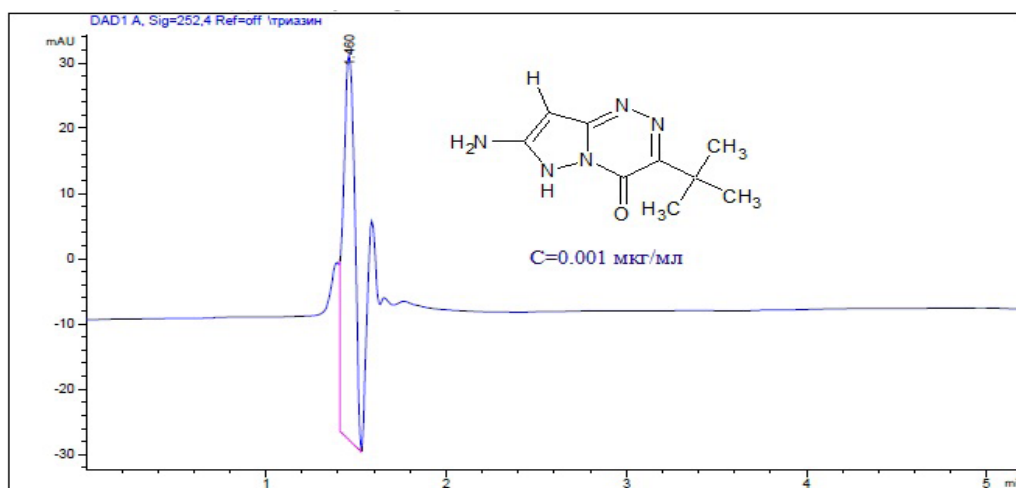


Рис. 7. Концентрация раствора 0.001 мкг/см³

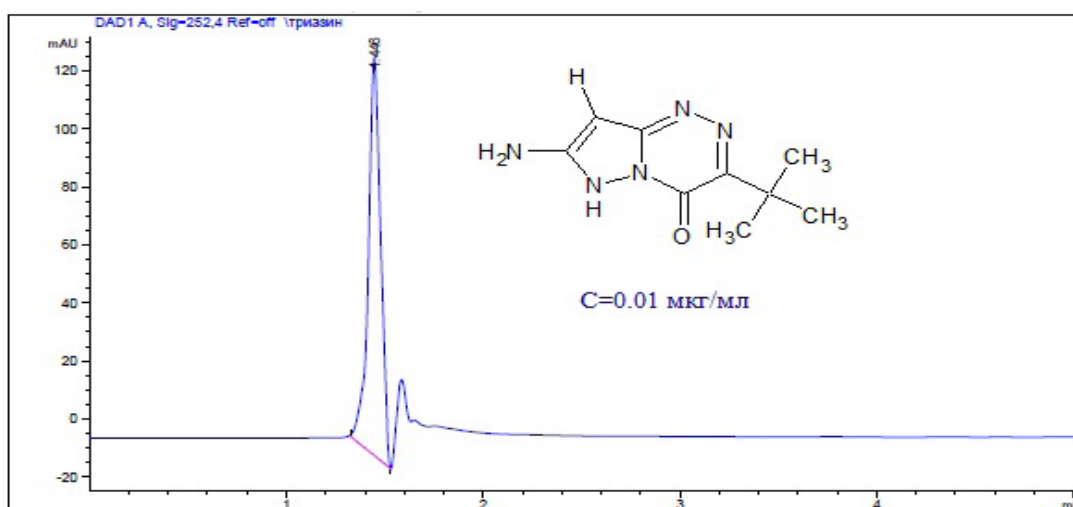


Рис. 8. Концентрация раствора 0.01 мкг/см³

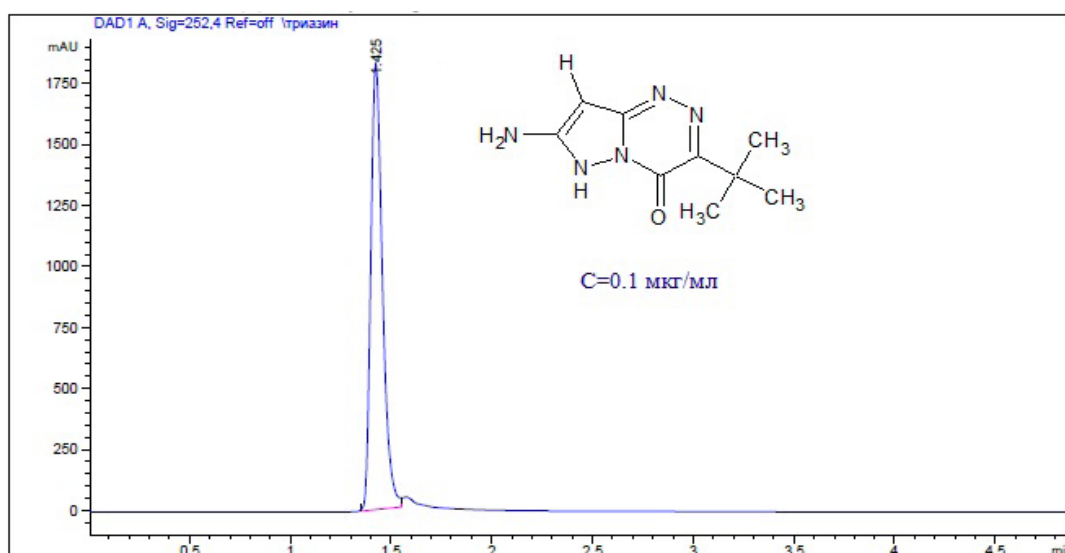


Рис. 9. Концентрация раствора 0.1 мкг/см³

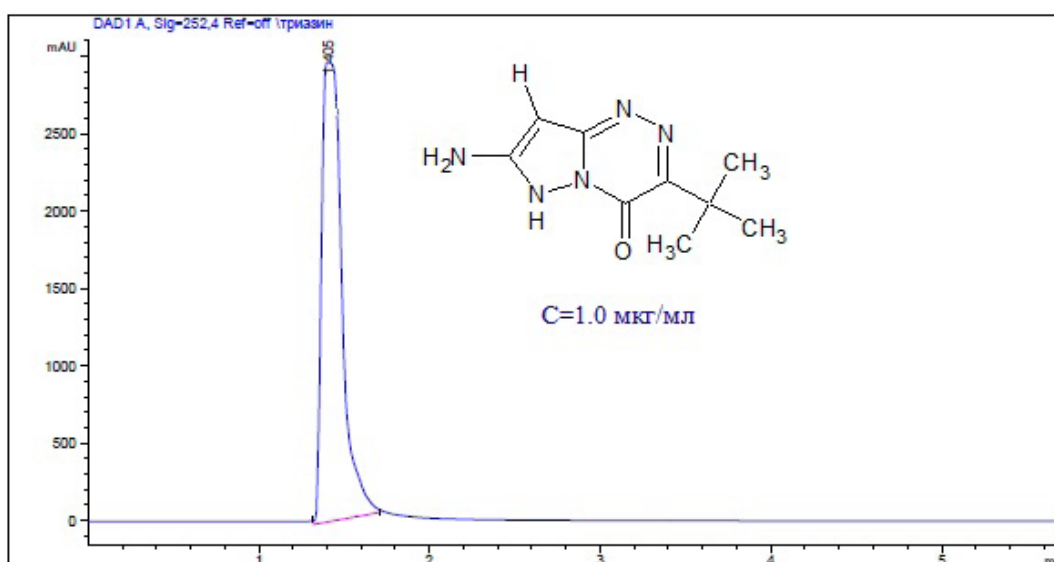


Рис. 10. Концентрация раствора 1.0 мкг/см³

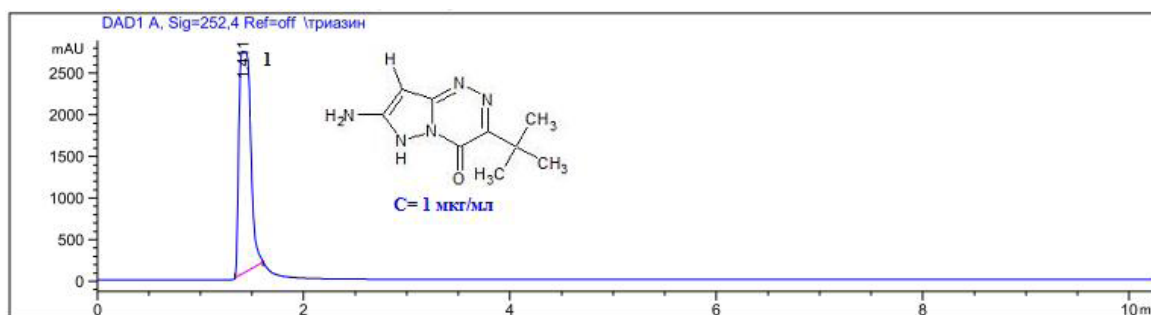


Рис. 11. Общая хроматограмма 7-амино-3-трет-бутилпиразоло [5,1-с] [1,2,4]триазин-4(6H)-она

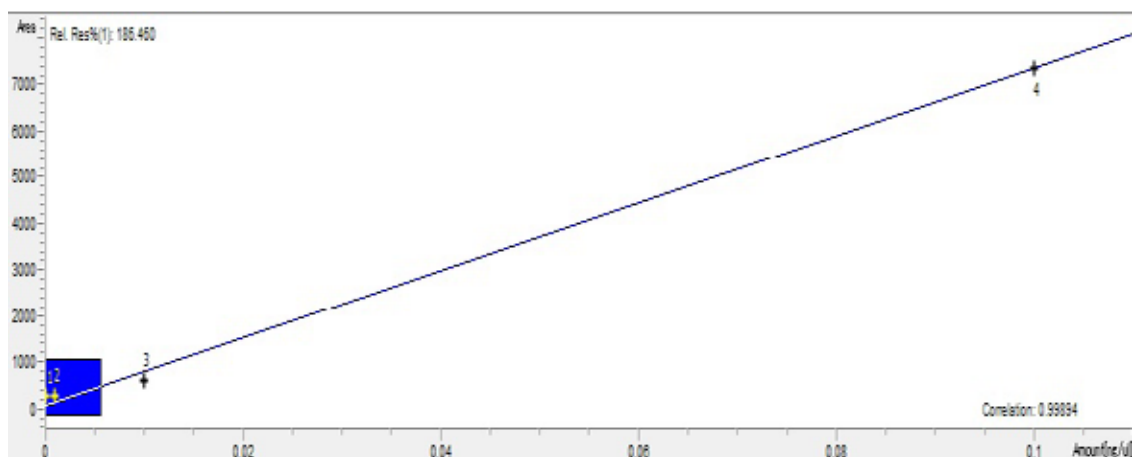


Рис. 12. Линейность методики определения 7-амино-3-трет-бутилпиразоло [5,1-с] [1,2,4]триазин-4(6H)-она

Линейность методики исследовали на 4 уровнях концентрации (рисунок 12) от теоретического содержания 7-амино-3-трет-бутилпиразоло [5,1-с] [1,2,4]триазин-4(6H)-она

Калибровочный график представлен в виде прямой линии с коэффициентом корреляции **0.99894** и практически равным 1, построенный по 4 м точкам.

Возможно, в дальнейшем, данный методический подход может оказаться полезным при постановке методик анализа других веществ с аналогичными структурами и свойствами.

Более подробное изучение всех критериев, факторов и параметров находится в стадии разработки, которые в дальнейшем будут оформлены как индивидуальная методика по рекомендациям CIPAC/4105/R.

Выводы

Предложен метод ВЭЖХ для идентификации замещенных 1.2.4-триазинов. Разработаны параметры хроматографической системы и условия элюирования, заключенные в методику определения веществ методом ВЭЖХ сходных по структуре и свойствам с 7-амино-3-трет-бутилпиразоло [5,1-с] [1,2,4]триазин-4(6H)-он.

Литература:

1. Шаповалова, Е. Н., Пирогов А. В. Хроматографические методы анализа: Методическое пособие для специального курса. — Москва: Московский Государственный Университет имени М. В. Ломоносова, 2007. — 203 с.
2. Бидлиншейер, Б. Препаративная жидкостная хроматография/Под ред. Бидлиншейера Б., пер. с англ. — Москва: 1990
3. CIPAC/4105/R. Guidelines for the Design of Chromatographic Analytical Methods Intended for CIPAC Collaborative Study.
4. Сычев, К. Оформление методик высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) в соответствии с международными рекомендациями: Журнал «Аналитика»/ИП Фирма «СКАН». — 2012. — С 60–66.
5. Mironovich, L. M., Podol'nikova A. Yu. Synthesis and Reactivity of 7-amino-3-tert-butylpirazolo [5,1-c] [1,2,4] triazin-4 (6H) — one/Journal of General Chemistry, Vol. 84., №12. — 2014. — С. 2064–2066

Красители для полиуретана

Ротарь Ольга Васильевна, кандидат химических наук, доцент;
Ротарь Виктор Григорьевич, кандидат технических наук, доцент;
Пименова Александра Сергеевна, студент
Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Искрижицкий Александр Александрович, главный специалист
«ТомскНИПнефть»

Исследована возможность крашения полиуретана пигментами и анилиновыми красителями. Отработаны методы совмещения красителей с сырьем, изучено влияние красителей на кинетику реакции образования полиуретанов. Отработаны методики количественного определения старения полиуретана по изменению оптической плотности образцов полиуретана в растворе и пленке при облучении УФ части солнечного и искусственного света.

Ключевые слова: полиуретан, органические пигменты, анилиновые красители

Производство полиуретана отличается от производства прочих полимеров тем, что при небольшом изменении химической природы исходных изоцианатов, соотношений их с эфирами и удлинителями цепи, катализаторами, возможно, получить готовые материалы, сильно отличающимися по свойствам. [1]. Старение полиуретана в естественных условиях происходит под воздействием солнечной радиации. Известно, что катализаторы полиуретанообразования способствуют реакции старения полиуретанов (ПУ), а также могут давать окрашенные соединения с компонентами сырья. Начало этого процесса у изделий из белого ПУ проявляется в появлении разнотонных, пожелтении поверхности с постепенным изменением окраски до коричневых оттенков [2,3]. Полиэфиры, используемые в производстве обуви, в зависимости от завода изготовителя согласно техническим условиям содержат примеси железа, ускоряющего реакции старения ПУ. Процессы старения можно значительно замедлить, для чего в композиции необходимо вводить дезактиваторы металлов и светостабилизаторы. Для окрашенных полимеров можно использовать большое количество антиоксидантов, то для белого обувного полиуретана ассортимент антиоксидантов не велик. В связи с возросшими требованиями к качеству и приданию эстетичного вида изделию, окрашиванию полимеров уделяется большое внимание.

Для крашения ПУ применяются органические пигменты, металлокомплексные соединения, анилиновые красители, цвет которых определяется строением вещества. Однако оттенок зависит от физического состояния пигмента и природы среды, в которой он диспергирован. Выбор красящего вещества, прежде всего, зависит от того, в какой цвет должно быть окрашено изделие. Цвет определяется также назначением изделия, технической и технологической возможностью. Свойства пигментов делятся условно на две группы:

1. свойства, которые нельзя изменить в процессе окрашивания: цвет, термостойкость, химическая стойкость к миграции, стоимость.

2. свойства, которые меняются в процессе: диспергируемость, интенсивность окрашивания.

Качество окрашивания полимеров зависит от массы и природы красящего вещества, а также от диспергирования пигмента в объеме материала, его измельчения, смачивания и распределения.

Цель исследования диктовалась производственной необходимостью. При наличии верха обуви различных цветов (синий, голубой, розовый и т.д.) необходимо было подобрать красители для обувного полиуретана различной цветовой гаммы.

Искусственное старение образцов ПУ проводили на визерометре светом ртутной лампы высокого давления (ДРШ — 120). Для регистрации изменения окраски образцов ПУ в процессе старения снимали спектр поглощения в интервале длин волн 323–900 нм. Изменение оптической плотности в области 400–450 нм позволило количественно оценить старение ПУ. С целью выявления цветостойкости были сняты УФ-спектры необлученных и облученных нефилтрованным светом лампы ПРК-6 всех красителей.

При использовании любого красящего вещества учитывали принадлежность его к различным классам органических соединений (реакционную активность), которые могут влиять на кинетику образования ПУ. В качестве красителей были выбраны пигменты красный, алый, розовый и желтый.

Нами изучено влияние данных пигментов на кинетику реакции получения ПУ. Для получения окраски различной глубины количество красителя варьировалось от 0,05 до 0,5%. Основная трудность в решении задачи крашения ПУ заключалась в совмещении красителей с компонентами полиуретановой композиции без нарушения технологии его получения. Исходя из физико-химических свойств применяемого сырья, необходимым условием была способность красителей растворяться в бутандиоле, полиэфире или расплавляться в форполимере. Используемые красители были тонкодисперсными и не содержали влаги.

При использовании анилиновых красителей (лак оранжевый, рубин, бордо, синий кубовый, малахитовый зеленый, фиолетовый Б-1, синий Б-2) возникли трудности, связанные с их гидрофильностью, что приводило к появлению большой пористости полимера. Используемые красители влияют на кинетику образования полимера, что видно из табл. 1. При получении ПУ основными параметрами реакции является скорость гелеобразования, скорость роста и скорость отверждения.

Как показали исследования, основные кинетические показатели (время гелеобразования, роста и отверждения, а также высота грибка) отличались от контрольного образца: увеличивается время гелеобразования, роста, но быстрее идет отверждение и увеличивается высота грибка.

Вследствие плохой диспергируемости красителей были исключены из эксперимента красители: малахитовый зеленый, фиолетовый Б-1, синий Б-2.

Было установлено, что лак оранжевый лучше растворяется в бутандиоле, а лак рубиновый хорошо совмещается с полиэфиром.

Для количественной оценки изменения цвета были определены оптические плотности облученных образцов и выдержанных в темноте. В качестве стабилизаторов были использованы агидол, беназол, диацетам.

Как видно из таблицы 2 уменьшение оптической плотности свидетельствует о выцветании красителя лака оранжевого.

На основании ультрафиолетовых спектров установили, что пик отражения облученного лака рубинового сдвига-

Таблица 1. Кинетика образования полиуретана

№п/п	Используемый пигмент	Содержание %	Скорость гелеобразования, с	Скорость роста, с	Скорость отверждения, с	Высота грибка, см
1	Лак оранжевый	1,5	7	18	60	3,5
2	Лак оранжевый	0,05	8	15	45	4,5
3.	Лак рубин	0,05	6	13	38	4,2
4.	Лак рубин	1,0	8	24	57	3,8
5.	Лак рубин	2,0	9	25	90	3,5
6.	Пигмент красный	0,1	7	24	90	3,5
7.	Пигмент красный	0,04	8	15	60	4,5
8.	Пигмент алый	0,1	6	20	60	3,8
9.	Пигмент алый	0,04	7	15	90	3,5
10.	Пигмент розовый	0,1	7	11	110	4,0
11.	Пигмент розовый	0,04	7	16	70	3,8
12.	Пигмент желтый	0,1	9	25	60	3,5
13.	Контрольный	-	6	10	90	2,8

Таблица 2. Изменение оптической плотности лака оранжевого (УФ-область, 340 нм)

№п/п	Стабилизатор	Концентрация лака, %	A	A
1	Агидол	0,3	0,045	1,6
2	Диацетам: Беназол	0,3	0,055	0,02
3.	Агидол: Беназол	0,5	0,125	0,03
4.	Агидол: Беназол	0,1	0,06	0,045
5.	Агидол: Беназол	0,3	0,075	1,16

Таблица 3. Светостабильность красителей

№п/п	Используемый пигмент	Изменение цвета образца после облучения
1	Лак оранжевый 1,5%	Оранжевый-оранжевый
2	Лак оранжевый 0,05%	Оранжевый — желтый
3.	Лак рубин 0,05%	Розовый — желтый
4.	Лак рубин 1%	Розовый — желтый
5.	Лак рубин 2%	Розовый — розовый

ется на 25нм (от350 до 375нм), а пик поглощения смещается на 80нм в коротковолновую область. Смещение полос в УФ-спектры лака происходит вследствие изменения его структуры. Под действием УФ-света окраска из малинового оттенка переходит в желтую окраску. Спектры об-

лученного и необлученного лака оранжевого идентичны, что свидетельствует о цветоустойчивости этого пигмента. Для сохранения цвета изделий опробован широкий круг стабилизаторов. Даны рекомендации по использованию исследованных красителей в производстве кроссовый обуви.

Литература:

1. П. Райт, А. Камминг Полиуретановые эластомеры. — Л.: Химия, 1973. — 304 С.
2. В.М. Сутягин, О.В. Ротарь Стабилизация микрокаучуковых полиуретанов. Материалы 8-ой международной конф. молодых ученых. — Казань, 1998. — с. 15–16.
3. О.В. Ротарь, В.М. Сутягин В.М. Изучение влияния различных факторов на образование полиуретана в производстве кроссовый обуви. Сб. научно-технической конф. «Новая химическая продукция; технология, применение и изготовление». — Кемерово, 2007. с. 54–56.

Исследование процесса конверсии сульфата натрия нитратом и нитритом кальция

Рузиева Зулфия Тогматовна, кандидат технических наук, доцент;
Сафаров Умидбек Бахромович, студент;
Хидирова Юлдуз Хужаназаровна, кандидат технических наук;
Нормаматов Фарход, ассистент
Каршинский инженерно-экономический институт (Узбекистан)

Исследована взаимосвязь основных технологических параметров, получены новые сведения по растворимости и характеру твёрдых фаз в двух четверных и тройных взаимных систем. Установлено оптимальные условия конверсии, фильтрация нитрит-нитрата кальция и натрия

В условиях мирового финансово-экономического кризиса очень своевременным оказалось издание книги Президента Республики Узбекистан Ислама Каримова «Мировой финансово — экономический кризис и меры по его преодолению в условиях Узбекистана», где убедительно показаны принципиальные возможности нашей Республики по преодолению кризиса за счет широкого внедрения инновационных технологий и организации производства продукции, в том числе и минеральных удобрений из местных сырьевых материалов. Так же в книге «Модернизация страны и построение сильного гражданского общества» отмечено, что одним из путей успешного преодоления кризиса является реализация стратегических проектов, направленных на модернизацию, техническое и технологическое обновление ведущих базовых отраслей [1].

Одним из главных направлений экономического развития Узбекистана является освоение природных ресурсов, их комплексное использование и создание конкурентоспособных, импортозамещающих продуктов на базе местных сырьевых ресурсов.

К таким важным химическим продуктам относятся нитриты, нитраты натрия и кальция, потребность в которых неуклонно растёт в связи с развитием отраслей народного хозяйства, потребляющих нитрит-нитратные соли натрия и кальция.

Основные потребители нитрит-нитратных солей натрия и кальция — станко-машиностроительная, металлургическая, бумажная, резиновая, текстильная, фармацевтическая, пищевая промышленность, строительная индустрия, медицина и сельское хозяйство.

Нитрит натрия можно получить по двум вариантам: взаимодействием сульфата натрия с нитритом кальция или нитрит-нитратом кальция, образующегося после абсорбции нитрозных газов известковым молоком. По первому варианту нитрит кальция подвергается конверсии сульфатом натрия с получением раствора нитрита натрия и осадка сульфата кальция. По второму варианту для получения натриевых солей нитрит-нитратный раствор кальция подвергается конверсии сульфатом натрия с получением нитрит-нитратного раствора натрия. Полученный раствор подвергается выпарке и кристаллизации с выпадением в твердую фазу нитрита натрия. После отделения центрифугированием готового продукта — нитрита натрия, маточный раствор нитрита натрия вновь возвращается на стадию выпарки (по первому варианту). Попутно полученный по обоим вариантам и сульфат кальция может использоваться в качестве гипсового строительного материала [2].

Необходимо отметить, что для физико-химического обоснования и разработки технологии получения нитрит-нитратных солей натрия и кальция на основе ни-

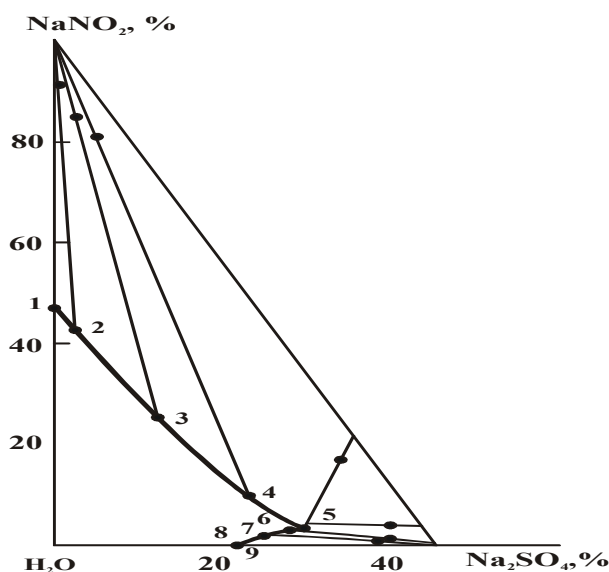


Рис. 1. Диаграмма растворимости системы нитрит натрия — сульфат натрия — вода при 25 °C

трозных газов, известняка и сульфата натрия необходимо знание совместной растворимости нитратов, нитритов и сульфатов натрия и кальция в сложных водно-солевых системах. Изучение технологических параметров процесса получения предлагаемых нитрит — нитратных солей натрия и кальция необходимо для разработки технологии их производства.

В связи с отсутствием в литературе сведений по тройным системам нитрит кальция — сульфат кальция — вода и нитрит натрия — сульфат натрия — вода исследована их растворимость изотермическим методом при 25 °C.

Равновесие фаз в системах $\text{Ca}(\text{NO}_2)_2 - \text{CaSO}_4 - \text{H}_2\text{O}$ и $\text{NaNO}_2 - \text{Na}_2\text{SO}_4 - \text{H}_2\text{O}$ при 25 °C устанавливалось при постоянном перемешивании и термостатировании соответственно через 1,5 и 1,0 суток. При количественном химическом анализе жидких и твердых фаз использовали общеизвестные методы аналитической химии [4]. Полученные данные использовали для определения составов твердых фаз по Шрейнемакерсу [2] и для построения изотермических диаграмм растворимости тройных систем нитрит кальция — сульфат кальция — вода и нитрит натрия — сульфат натрия — вода при 25 °C (рис. 1 и 2).

Диаграмма растворимости тройной системы нитрит натрия — сульфат натрия-вода при 25 °C характеризуется наличием двух ветвей кристаллизации твердых фаз — нитрита натрия и десятиводного кристаллогидрата сульфата натрия (рис. 1). Ветвь кристаллизации нитрата натрия значительно больше, чем десятиводного сульфата натрия. Полученные данные показывают, что в изученной системе не происходит образования ни твердых растворов, ни новых химических соединений на основе исходных компонентов. Особенность изотермы растворимости в том, что сульфат натрия оказывает высаливающее действие на нитрит натрия. Поэтому растворимость последнего в присутствии сульфата натрия понижается до эвтонической точки системы.

Как следует из рис. 1, первоначальная растворимость нитрита натрия в воде при 25 °C равна 46,7 %, а в присутствии 30,14–30,17 % сульфата натрия этот показатель составляет лишь 2,96–3,01 %.

Сульфат натрия в присутствии нитрита натрия при 25 °C повышает свою растворимость с 21,90 до 30,14–30,17 %, то есть в изученной системе наблюдается высаливающее действие нитрита натрия на сульфат натрия. В связи с этим эвтонический раствор системы обогащается сульфатом натрия при одновременном содержании нитрита натрия.

На изотермической диаграмме растворимости тройной системы нитрит кальция — сульфат кальция — вода установлено наличие двух ветвей, отвечающих кристаллизации $\text{Ca}(\text{NO}_2)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ и $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (рис 2) Ветвь кристаллизации двуводного сульфата кальция широкая и простирается до 44,23 % — ного содержания нитрита кальция в растворе. Ветвь кристаллизации $\text{Ca}(\text{NO}_2)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ очень узкая и соответствует интервалу 44,23–45,20 % — ных концентрации нитрита кальция (таблица 1).

Благодаря хорошей растворимости в данной системе, нитрит кальция оказывает высаливающее действие на сульфат кальция, в результате чего растворимость последнего по сравнению с его первоначальной растворимостью в воде понижается до эвтонической точки системы с 0,21 до 0,017 %.

Опыт проводился на лабораторной установке, состоящей из стеклянного реактора, снабженного лопастной мешалкой, помещенного в термостат, скорость вращения электродвигателя регулировали реостатным устройством и измеряли тахометром ТМ-ЗМ, с использованием датчика Д-1 мм. Температуру водяного термостата, нагревающего реактор, поддерживали с помощью контактного термометра ТК — 300 и электронного реле РТ — 230 Гц

Методика эксперимента заключалась в следующем: расчетное количество $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ или $\text{Ca}(\text{NO}_2)_2$ загру-

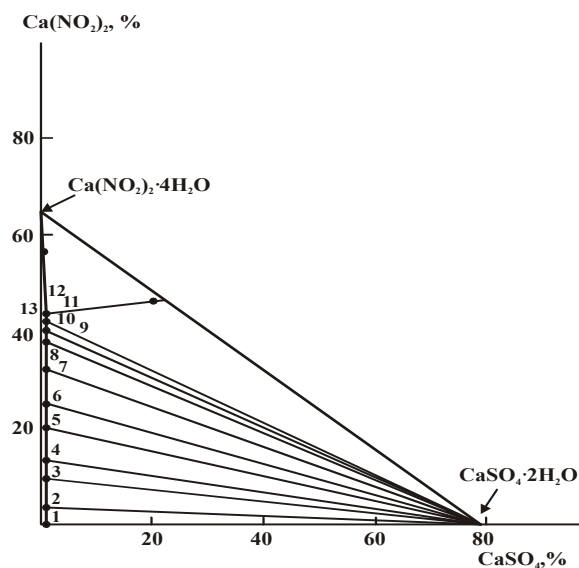


Рис. 2. Диаграмма растворимости системы нитрит кальция — сульфат кальция — вода при 25 °С

жалось в реактор. Туда же добавляли Na_2SO_4 и приготовленный раствор нитрата или нитрита натрия, а затем дистиллированную воду.

После чего реактор помещали в термостат с заданной температурой и пульпу перемешивали в течение 2 часов.

Фильтрация пульпы проводилась на фильтровальной воронке, помещённой в колбу Бюнзена, которая присоединялась к вакуум-фильтру [4].

Эксперименты по получению нитрита и нитрата натрия проводили при температурах 25, 30, и 40°C и концентрации оборотного раствора нитрита и нитрата натрия 25,0; 40,0; 50,0%.

Полученные данные показывают, что с уменьшением концентрации оборотных растворов нитрата и нитрита натрия и с увеличением соотношения твёрдой и жидкой фаз с 1:2,5 до 1:3,5 скорость фильтрации пульпы с осадками гипса возрастает.

При концентрации оборотного растворов NaNO_3 40 и 50% и соотношении Т: Ж=1:2,5 скорость фильтрации пульпы с осадками гипса составляет 1003,5 и 820,1 кг/м². час. При соотношении Т: Ж=1:3,5; 1:5 и концентрации оборотных растворов NaNO_3 40 и 50% скорость филь-

трации колеблется соответственно в пределах 5006,4 □ 3520,2 и 9086,37451,6 кг/м². час.

При соотношении Т: Ж=1:2,5; 1:3; 1:5 и концентрации оборотного раствора нитрита натрия 40,0% скорость фильтрации составляет соответственно 1010,41; 5091,56; 91273,51 кг/м². час. т.е. привело к увеличению скорости фильтрации на 44,6%.

Уменьшение скорости фильтрации с увеличением концентрации объясняется увеличением вязкости раствора, что ухудшает ее фильтруемость.

При соотношении Т: Ж=1:3,5 и 1:5 уменьшение скорости фильтрации с увеличением концентрации жидкой фазы происходит не так резко как при соотношении Т: Ж=1:2,5, что также объясняется ухудшением фильтруемости при повышении количества твёрдой фазы.

Таким образом, в результате вышеприведенных исследований, выявлены следующие оптимальные технологические параметры процесса конверсии нитрита кальция сульфатом натрия: температура — 25–30°C, концентрация оборотного раствора нитрита и нитрата натрия 40–50,0%. Также усвоено, что конверсионные пульпы обладают достаточно хорошей фильтруемостью.

Таблица 1. Данные по растворимости в системе $\text{NaNO}_2\text{-Na}_2\text{SO}_4\text{-H}_2\text{O}$ при 250С

№	Состав жидкой фазы, %			Состав влажного «остатка», %			Твердая фаза
	$\text{Ca}(\text{NO}_2)_2$	Na_2SO_4	H_2O	$\text{Ca}(\text{NO}_2)_2$	Na_2SO_4	H_2O	
1	46,70	-	53,30	96,3	-	3,7	NaNO_2
2	42,84	1,99	55,17	91,42	0,61	7,97	««««
3	25,44	11,59	62,97	85,11	2,01	12,88	««««
4	9,24	22,70	68,06	80,85	4,59	14,56	««««
5	2,96	30,17	66,87	17,1	34,5	48,40	««««
6	3,01	30,17	66,85	4,05	40,13	55,82	NaNO_2 + $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$
7	2,75	28,45	68,80	0,81	39,2	59,99	$\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$

Литература:

1. Каримов, И.А. «Мировой финансово-экономический кризис, пути и меры по его преодолению в условиях Узбекистана» Т., Узбекистан, 2009 г.
2. Справочник по растворимости. В 3-х. т./Коган В.Б., Огородников С.К., Кафаров В.В., под ред. В.В. Кафарова Т.З. Кн. 1. — Л.: Наука. — 1969. — с 944.
3. Шварценбах, Г., Флашка Г. Комплексонометрическое титрование. — М.: Химия. — 1970. — 360 с.
4. Атрошенко, В.И. и др. Технология связанного азота. Киев. «Выш. школа». — 1985. — 327 с.

Окисление фенола под действием окислительной системы генерируемой *in situ* в водных растворах серной кислоты

Федорова Оксана Юрьевна, магистрант;

Волгина Татьяна Николаевна, кандидат химических наук, доцент
Национальный исследовательский Томский политехнический университет

*Исследован способ деструктивного окисления фенола до углекислого газа и воды в мягких условиях. Определено влияние каталитических добавок серебра на степень превращения фенола в процессах жидкофазного окисления и непрямого электроокисления под действием окислителей, образующихся электрохимически *in situ* в сернокислотных растворах фенола. Степень деструкции фенола в присутствии серебра, при продолжительности процесса 40 мин, составляет 58–81%. Наиболее эффективно глубокое окисление идет в присутствии AgNO_3 с концентрацией $0,6 \cdot 10^{-7}$ моль/дм³.*

Ключевые слова: окисление фенола, катализаторы окисления, окислительная система, жидкофазное окисление, не прямое электроокисление, химическое потребление кислорода, инверсионная вольтамперометрия.

Процессы жидкофазного окисления фенолов изучены достаточно широко. Поэтому в качестве окислителей, в зависимости от того какой продукт окисления фенола следует получить, предлагается использовать целый ряд соединений как органической, так и неорганической природы. Однако в процессах деструктивного окисления $\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$ в жидкой фазе наиболее популярными являются [1]: персульфаты, пероксиды, кислород и озон. Данные окислители могут быть введены в жидкофазную систему извне или получены непосредственно в реакционном объеме *in situ*. Одним из вариантов генерирования окислителей *in situ* является процесс электролиза, при котором синтез окислительной системы, жидкофазное и электрохимическое окисление органического субстрата протекают одновременно [2]. Интенсифицировать процесс окисления возможно за счет добавления различных каталитических систем.

Цель данной работы заключалась в исследовании влияния каталитических добавок на скорость глубокого окисления фенола под действием окислительной системы, генерируемой при пропускании электрического тока через водные растворы серной кислоты.

Деструктивное окисление фенола (с исходной концентрацией 0,017 моль/л) до нетоксичных компонентов проводили в бездиафрагменном электролизере (объемом 70 дм³) со свинцовыми электродами (с рабочей площадью

10 см²) и мешалкой в 40%-ных растворах серной кислоты, при плотности тока 0,5 А/см², температуре 20°C и атмосферном давлении. В качестве каталитической добавки использовали серебро и его соли в количестве 10^{-7} – 10^{-4} моль/дм³. Эффективность окисления фенола в лабораторных условиях оценивали, определяя показатель ХПК (химическое потребление кислорода) на микропроцессорном анализаторе Экотест-120. Содержание серебра определяли методом инверсионной вольтамперометрии на анализаторе ТА-4.

Предварительные эксперименты показали, что деструктивное окисление фенола в растворах серной кислоты (без наложения электрического тока) в присутствии AgNO_3 протекает в два раза быстрее. Окисление фенола в условиях данного эксперимента протекает по схеме, представленной на рисунке 1, которая согласуется с некоторыми литературными данными [3].

Суммарное содержание органического углерода без каталитической добавки снижается в течение 10 суток всего на 28% (табл. 1), что на 50% меньше, в сравнении с окислением, которое катализируется серебром. Следовательно, получаемые в результате диссоциации соли AgNO_3 ионы Ag^+ производят каталитический эффект, что делает возможным использование серебра для интенсификации процесса жидкофазного окисления фенола. Однако здесь виден главный недостаток — это большая продолжитель-

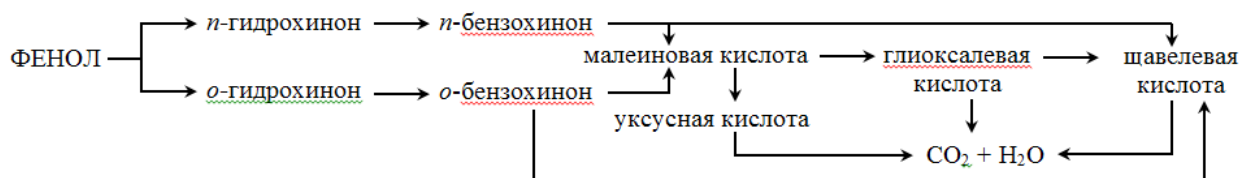


Рис. 1. Схема глубокого окисления фенола

ность процесса. Сократить время окисления возможно за счет использования постоянного электрического тока.

Исследования показали, что при наложении электрического тока окисление фенола протекает на несколько порядков быстрее, но добавление Ag^+ в концентрациях 10^{-6} – 10^{-4} моль/дм³ оказывает тормозящее действие (табл. 2).

Это происходит вследствие того, что протекают электрохимические процессы восстановления ионов серебра на свинцовом катоде по реакции: $Ag^+ + e^- = Ag^0$. Причем,

чем больше начальная концентрация Ag^+ в растворе, тем большее его количество осаждается на поверхности свинцового катода — невооруженным глазом были видны на свинцовом катоде игольчатые вкрапления серебристого цвета (табл. 3).

Максимально эффективно фенол разрушает при концентрации серебра $0,6 \cdot 10^{-7}$ моль/дм³, при этом степень превращения () по органическому углероду увеличивается на 6% в сравнении с безкаталитическим процессом.

Таблица 1. Изменение ХПК (мгО₂/дм³) растворов фенола при окислении в 40% H₂SO₄

τ, мин	C _{AgNO₃} (0,0034 моль/дм ³)	τ, мин	C _{AgNO₃} (0,00 моль/дм ³)
0	432,2	0	432,2
1440	419,8	480	242,3
4320	410,55	9120	108,5
7200	403,7	20632	92,6
11520	364,25	33592	86,4
14400	310,6	37912	51,0
k _r , мин ⁻¹	(2,035±0,3857) × 10 ⁻⁵	k _r , мин ⁻¹	(4,213±1,076) × 10 ⁻⁵

Таблица 2. Изменение ХПК (мгО₂/дм³) растворов фенола при непрямом электроокислении

τ, мин	C _{AgNO₃} , моль/дм ³						
	0	0,6·10 ⁻⁷	10 ⁻⁶	10 ⁻⁵	17·10 ⁻⁴	34·10 ⁻⁴	50·10 ⁻⁴
0	432,2	432,2	432,2	432,2	432,2	432,2	432,2
10	257,85	246,43	311,1	381,7	391,78	294,76	382,1
20	183,4	163,13	264,1	283,3	339,22	266,39	336,9
30	148,7	114,73	206,2	252,6	269,21	224,17	278,45
40	89,05	66,77	182,1	214,1	240,28	182,11	230,95
, %	79	85	58	50	44	58	47

Таблица 3. Содержание Ag+ до и после проведения непрямого электроокисления фенола

C _{AgNO₃} , моль/дм ³	τ, мин	C _{Ag+} , мг/дм ³				
		C ₁	C ₂	C ₃	C _{средн}	C _{теор.}
0,0017	0	108	97	—	102,5	182
	40	89,1	74	95,3	86,3	-
0,0034	0	—	469	294	381,5	364
	40	102	198	122	140,7	-
0,0050	0	390	—	260	325	535
	40	176	225	—	253	-

Таблица 4. Изменение ХПК ($\text{мгО}_2/\text{дм}^3$) растворов фенола при непрямом электроокислении

τ , мин	Обозначение способа внесения серебра					
	1	2	3	4	5	6
0	432,2	432,2	432,2	432,2	432,2	432,2
10	347,8	403,7	293,1	294,76	268,6	358,83
20	266,9	301,7	286,3	266,39	188,9	265,73
30	220,5	221,3	193,9	224,17	157,3	187,93
40	181,2	166,9	163,2	182,11	81,9	119,13
α , %	58	62	62	58	81	72

Так как предыдущие эксперименты показали, что ион формы Ag^+ восстанавливается, то возникла необходимость исследовать возможность внесения серебра другими способами. В качестве источников серебра были выбраны:

- свинцовый катод, покрытый слоем электрохимически нанесенного Ag^+ (1);
- свинцовый катод, выдержанный в насыщенном растворе AgNO_3 (2);
- металлическое серебро в качестве катода (3);
- раствор серной кислоты с содержанием $\text{AgNO}_3 0,0034$ моль/ дм^3 (4);
- металлическое серебро в качестве анода (5);
- свинцовый анод, выдержанный в насыщенном растворе AgNO_3 (6);

Из приведенных в таблице значений мы видим, что при использовании серебряной соли AgNO_3 (4), с концентрацией $0,0034$ моль/ дм^3 наблюдается наименьшее значение степени превращения равное 58%. Это происходит вследствие того, что здесь основным процессом является процесс восстановления серебра на катоде.

При применении свинцового анода, покрытого слоем электрохимически нанесенного Ag^+ (1) степень превращения минимальна (58%), так же как и в опыте (4). Значение ХПК через первых 10 минут электроокисления больше в случае (1) по сравнению с (4). При использовании электродов, насыщенных ионами Ag^+ электрохимическим путем, часть ионов переходит в раствор и оказывает незначительно ускоряющее действие на реакцию непрямого электрохимического окисления фенола лишь в начальный момент времени. В дальнейшем происходит разрушение серебряного слоя на поверхности свинцового анода с образованием оксида серебра, который оседает на дне электролизера и тем самым каталитический эффект действия серебра прекращается.

В случае использования серебряного катода (2) и (3), казалось бы, что скорость восстановления ионов серебра должна несколько замедлиться. Но, несмотря

на то, что поверхность катода уже покрыта серебряным слоем, а часть избыточных ионов серебра с поверхности катода растворяется в объеме электролита, Ag^+ в данном случае оказывают незначительный каталитический эффект на процесс непрямого электрохимического окисления фенола. Экспериментальные данные показывают, что степень превращения в опытах (2) и (3) отличается от полученных данных для опытов (1) и (4) всего на 6%.

Меньшее значение α в опыте (4), в сравнении с (2) и (3), говорит о том, что реакции восстановления серебра на катоде ускоряются, так как потенциал свинцового катода позволяет с достаточно высокой скоростью вести осаждение серебра на свинцовой поверхности. Но в целом способы внесения серебра в раствор (1), (2), (3) и (4) оказывают ингибирующее действие.

По представленным экспериментальным данным можно сделать выводы о том, что лучше всего внести серебро путем выдерживания свинцового анода в насыщенном растворе Ag^+ (6) или при использовании металлической серебряной проволоки закрепленной на поверхности свинцового анода (5). Однако в случае (6) степень превращения фенола на 9% меньше, чем для (5). Это происходит вследствие того, что серебро, покрывающее поверхность анода в первые минуты процесса (до того момента пока оно полностью не перейдет в объем электролита) препятствует образованию оксидной пленки свинца на поверхности которой должен протекать синтез окислителей (последние в свою очередь должны ускорить процесс окисления фенола в жидкой среде). Об этом свидетельствуют и значения ХПК растворов фенола.

Самое наибольшее значение α наблюдается для (5). В этом случае электрохимическая реакция растворения серебра по уравнению $\text{Ag}^0 - \bar{e} = \text{Ag}^+$ протекает параллельно реакциям образования окислительной системы на PbO_2 . Поэтому каталитический эффект Ag^+ является более ощутимым и явным.

Литература:

1. М. А. Шевченко, М. А., Марченко П. В., Таран П. Н., Лизунов В. В. Окислители в технологии водообработки. — Киев: Наукова думка, 1979. — 173 с.

2. Волгина, Т. Н., Кукурина О. С., Новиков В. Т. Исследование деструкции фенола окислительным способом // Химия в интересах устойчивого развития, 2005. — № 1. — с. 41–44.
3. Сайт НПО Позитрон-Квинта: <http://www.tk-pozitron.ru/ozon/about.php> (дата обращения: 30.04.2015).

Природные пищевые красители, их синтетические аналоги и влияние на организм

Хайбуллина Гульназ Равильевна, студент;

Научный руководитель: Лиманский Евгений Сергеевич, кандидат фармацевтических наук, старший преподаватель
Пермская государственная фармацевтическая академия Минздрава России

Пищевой краситель — это пищевая добавка, предназначенная для придания, усиления или восстановления окраски пищевых продуктов.

Использование природных красителей было известно еще за 3000 лет до н. э. В Грецию красители везли из Индии, где их добывали из растения рода Индиго (*Indigofera*). В Европе и в России индиго получали из растений вида Вайда красильная.

Один из древнейших красителей — пурпур, еще в X в. до н. э. финикийцы получали из улиток-багрянок. Для получения одного грамма пурпура нужно было обработать 10000 улиток.

В Древнем Риме для стабилизации вина использовали сернистую кислоту и соли свинца. Во Франции с 1860 г. вина стали подкрашивать фуксином. [3]

К пищевым красителям не относятся красители, применяемые для окрашивания несъедобных наружных частей продуктов, например: оболочек для сыров и колбас, поверхностей для клеймения мяса и маркировки сыров и яиц.

Применение красителей позволяет создать широкий ассортимент пищевых продуктов, отличающихся по цвету, восстановить или усилить интенсивность окраски и стандартизировать характеристики цвета пищевой продукции. [1]

Пищевые красители обозначаются буквенным и числовым кодом. Буквенный код «Е» это первая буква в слове Europe или перевод с немецкого и английского языка слов *ebsbar/edible*, что означает съедобный».

Согласно европейской системе выделяют категории пищевых добавок:

E100-E199 (красители), E200-E299 (консерванты), E300-E399 (антиоксиданты), E400-E499 (стабилизаторы), E500-E599 (эмульгаторы), E600-E699 (усилители вкуса), E900-E999 (антифламинги), E1000-E1999 (дополнительные пищевые добавки).

В России действует ГОСТ Р 52481–2005 «Красители пищевые. Термины и определения», регламентирующий получение природных пищевых красителей из сырья растительного или животного происхождения. [3]

Сырьем для производства красителей служат различные части дикорастущих и культурных растений, отходы переработки винодельческих и сокодобывающих

заводов. Некоторые из них получают химическим или микробиологическим синтезом.

Основу технологии производства НПК составляют процессы экстракции и сублимации. Выбор способа выделения зависит от особенностей самого сырья и свойств извлекаемого пигмента.

Чаще всего НПК получают в виде соков и экстрактов, извлекая пигменты соответствующим растворителем. Для экстракции водорастворимых антоцианов используют воду или этанол. Липофильные хлорофиллы и каротиноиды выделяют с помощью неполярных растворителей, растительных масел. [2]

Например, белый цвет получают из мела, белой глины, молока, сливок. Малиновый из сока малины и свеклы. Карминовый из альбеда — это выжимки из кожицы красного винограда. Красный цвет — сок барбариса, вишни, красной смородины и клубники. Бордовый — галлы фисташкового дерева. Коричневый из крепкого кофейного настоя или шоколада. Оранжевый и желтый дает куркума, шафран, апельсиновая или мандариновая цедра. Зеленый и фисташковый цвета экстрагируют из сока шпината, кожуры зеленых яблок, фисташки, японский чай матча. Синий — это крахмал, подкрашенный индиго. В пищевой промышленности используют Индигокармин, выделяемый из некоторых видов моллюсков. Фиолетовый — сок черной смородины. [5]

Каждый пищевой краситель так или иначе влияет на организм.

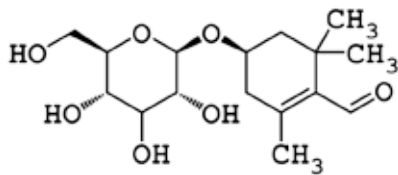
Куркумин Е-100. Получают путем экстрагирования порошка из корня куркумы петролейным эфиром и спиртом.

Обладает цитостатическим действием. Повышает клеточный иммунитет, благотворно влияет на миокард. У людей, страдающих болезнью Альцгеймера наблюдается позитивная динамика после применения куркумина. [6]

Альфа-, бета-, гамма-каротиноиды, Е160а. Продуцентами для биосинтеза каротиноидов являются бактерии, и мицелиальные грибы.

Каротиноиды — имеют желтый, оранжевый и красный цвета. Содержатся в красном перце, персиках, моркови. Обладают антиоксидантными свойствами и являются источником ретинола (витамина А), **выводят** токсины. Снижают воздействие радиоактивного излучения. [6]

Шафран, E164. С арабского языка название «шафран» (azafran) переводится как «желтый». Он имеет ярко оранжевую окраску. Сырьем являются рыльца цветков крокусов.

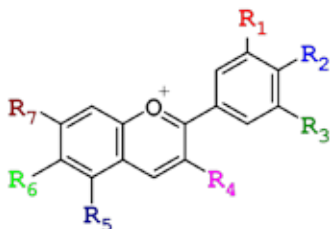


Способствует выработке лейцин-энкефалина и метионин-энкефалина. Улучшает пищеварение, очищает лимфу, почки и печень. Укрепляет органы дыхательной системы. Обладает вазодилатирующим действием. Благоприятно влияет на состояние кожи. На его основе создают препараты и капли для глаз. [6]

Антоцианы E163 являются гликозидами. Водорастворимые пигменты вакуолей. Название происходит от двух греческих слов anthos (цветок) и kyanos (синий).

На их окраску влияет число и природа заместителей. Так антоцианы, несущие в 2-фенильном кольце одну, две и три гидроксильные группы, окрашены, соответственно в оранжевый, красный и пурпурный цвета.

Употребление антоцианов в пищу сокращает риск поражения раком пищевода и прямой кишки, способствуют снижению воспалительных процессов в организме. [6]



Ликопин E160d — каротиноидный пигмент, определяющий окраску плодов растений, например томатов, гуавы, арбуза.

Получают путем экстракции из растений или биотехнологическим синтезом из биомассы гриба *Blakeslea trispora*.

Основная функция — антиоксидантная. Замедляет развитие атеросклероза, а также обеспечивает защитную функцию ДНК, что может предотвращать онкогенез. Замедляет перекисные процессы в тканях. Снижает риск развития катаракты. Применяется как лечебное средство при воспалительных заболеваниях. [6]

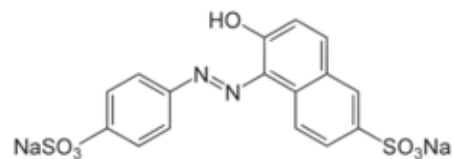
Лютеин E161b. Относится к ксантофиллам — группе кислородосодержащих каротиноидов. В переводе с греческого означает «желтый лист». В большом количестве содержится в желто-красных овощах и фруктах (в моркови, хурме, авокадо). В животном мире встречается в курином желтке.

Лютеин является жирорастворимым красителем. Увеличивает остроту зрения, предотвращает помутнение хрусталика и уменьшает риск дегенерации сетчатки глаза, способствует защите и обновлению клеток организма. [6]

Натуральные пищевые красители имеют свои синтетические аналоги, которые представлены несколькими классами органических соединений: азокрасители (тартазин — E102, желтый «солнечный закат» — E110, кармуазин — E122, пунцовый — E124, черный блестящий — E151); триарилметановые красители (синий патентованный — E131, синий блестящий — E133, зеленый — E142); хинолиновые (желтый хинолиновый — E104); индигоидные (индигокармин — E132).

Рассмотрим некоторые из них.

Жёлтый «солнечный закат» (англ. *SunsetYellowFCF*), также **Апельсиновый жёлтый** (англ. *OrangeYellowS*) **E110.**

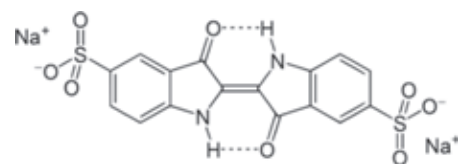


Относится к азокрасителям. Является производным «Судан I» — сильного канцерогена, который присутствует в E110 в качестве примеси. Приводит к аллергическим реакциям, особенно у людей с непереносимостью аспирина. Аллергия проявляется в виде тошноты, крапивницы, заложенности носа, ринита. Провоцирует гиперактивность и дефицит внимания у детей. Усиливает расстройства при синдроме Туррета. [7]

Синий патентованный E-131, Желтый хинолиновый E104

Относящийся к группе триарилметановых красителей и **Желтый хинолиновый E104**, относящийся к группе хинолиновых имеют схожие побочные действия, а именно: астма, желудочно-кишечные расстройства, анафилаксия, крапивница, аллергические реакции. Опасны для чувствительных к аспирину. [4]

Индигокармин E132



Группа индигоидных красителей. При нарушении технологии производства вызывает, проблемы с сердцем, тошноту, провоцирует приступы удушья у астматиков и вызывает аллергические реакции. [4]

Природные пищевые красители практически безвредны и вызывают побочные эффекты только по показаниям или личной непереносимости. Процесс экстракции длительный, трудоемкий и требует переработки большого количества сырья. В связи с этим, производители предпочитают использовать их синтетические аналоги. Процесс их синтеза проще и позволяет получить гораздо больший объем красителя. Однако, синтезированные аналоги лишены сопутствующих веществ, которые всегда имеются в натуральных, поэтому часто пагубно влияют на организм человека.

Литература:

1. Определение пищевых красителей согласно Директиве ЕС по красителям [1] — раздел 2.1.
2. Пищевые добавки: Энциклопедия — Сарафанова Л. А.
3. Смирнов, Е. В. Пищевые красители. Справочник. — СПб.: Издательство «Профессия», 2009. — 352 с.
4. Ива — Италики. — М.: Советская энциклопедия, 1972. — (Большая советская энциклопедия: в 30 т./гл. ред. А. М. Прохоров; 1969–1978, т. 10).
5. <http://sweetmenu.ru/articles/theory/naturalnyie-pishhevyie-krasiteli.html>
6. <http://am-am.su/5-pischevye-krasiteli-indeksy-e100-e199.html>
7. <http://am-am.su/106-pischevoy-krasitel-e110-zheltyy-solnechnyy-zakat.html>

ИНФОРМАТИКА

Вычисление «неберущихся» интегралов с помощью электронных таблиц Microsoft Excel

Алексеев Николай Леонидович, преподаватель
Югорский политехнический колледж

Сегодня умение пользоваться компьютером — насущная необходимость полноценного получения знаний для студента. Предлагая студентам ту или иную задачу, мы, прежде всего, учитываем наличие знаний по данному вопросу.

Рассмотрим пример урока по теме: Вычисление «неберущихся» интегралов с помощью электронных таблиц Microsoft Excel. Цели урока:

1. Познакомить учащихся с методами приближённого вычисления определённого интеграла.
2. Показать возможность применения электронных таблиц к приближённому вычислению определённых интегралов.

Задача учителя состоит в том, чтобы создать проблемную ситуацию, направить студентов на ее решение, организовать поиск решения. Для этого с учащимися необходимо повторить основные формулы интегрирования, сущность изученных методов интегрирования, геометрический смысл определённого интеграла.

При вычислении производной, мы используем таблицу производных и правила дифференцирования. Результат этих операций приводит к тому, что производная любой элементарной функции снова является элементарной функцией.

В некоторых случаях встречаются определённые интегралы от функций, первообразные которых не выражаются через элементарные функции. Кроме того, иногда приходится иметь дело с определёнными интегралами, сами подынтегральные функции не являются элементарными, то есть функция задается графиком или таблицей полученных значений. Поэтому мы во многих случаях не можем найти точное значение определённого интеграла по формуле Ньютона-Лейбница. Трудность операции интегрирования ещё состоит в том, что для неё нет универсального правила нахождения первообразных.

В науке и её приложениях в технике, экономике и других дисциплинах применяются многие неэлементарные функции; часто их называют *специальными*. К специальным функциям относятся и многие первообразные для элементарных функций, причём часто не столь уж «сложной» структуры. Интегралы, выражающиеся через такие первообразные, называются *неберущимися*. Итак, интеграл $\int f(x)dx = F(x) + C$ не берётся, если функция $F(x)$ не является элементарной. Можно показать, что интегралы от некоторых элементарных функций уже не являются элементарными функциями. Примерами таких интегралов могут служить следующие интегралы:

1. $\int e^{-x^2} dx$ — интеграл Пуассона. Функция $\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$ называется функцией Лапласа или интегралом вероятности. Она широко применяется в теории вероятностей, физике, математической и прикладной статистике и других разделах науки и её приложений. Для вычисления значений функции Лапласа составлены таблицы, имеющиеся во многих учебниках, задачниках и справочниках по теории вероятностей и статистике. Интеграл Пуассона широко применяется в теории вероятности;

$$\int_0^x \sin(t^2) dt, \int_0^x \cos(t^2) dt \text{ — интегралы Френеля;}$$

2. $\int \frac{dx}{\ln x}$ — интегральный логарифм;

3. $\int \frac{\sin x}{x} dx$ — интегральный синус;

4. $\int \frac{\cos x}{x} dx$ — интегральный косинус;

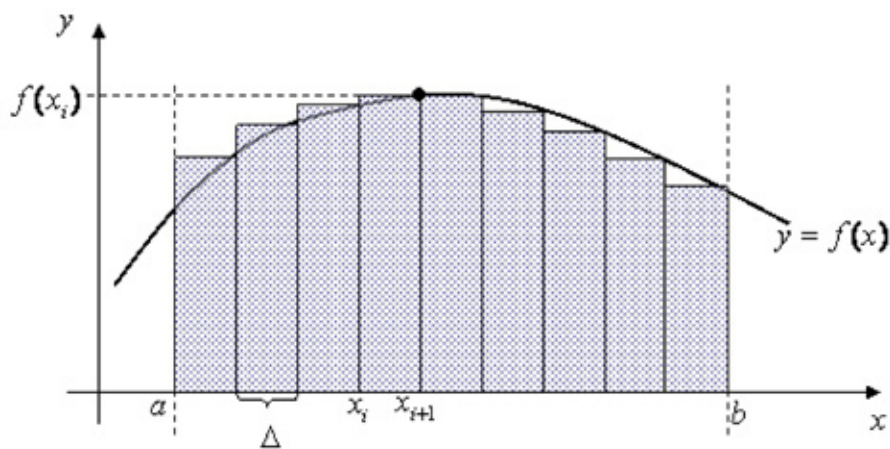
5. $\int \frac{e^x}{x} dx$ — интегральная экспонента.

Когда не удаётся выразить интеграл в замкнутой форме, или полученная формула сложна, или подынтегральная функция задана таблично, используют численное интегрирование, которое основывается на том, что интеграл представляется в виде предела интегральной суммы (суммы площадей), и позволяют определить эту сумму с приемлемой точностью.

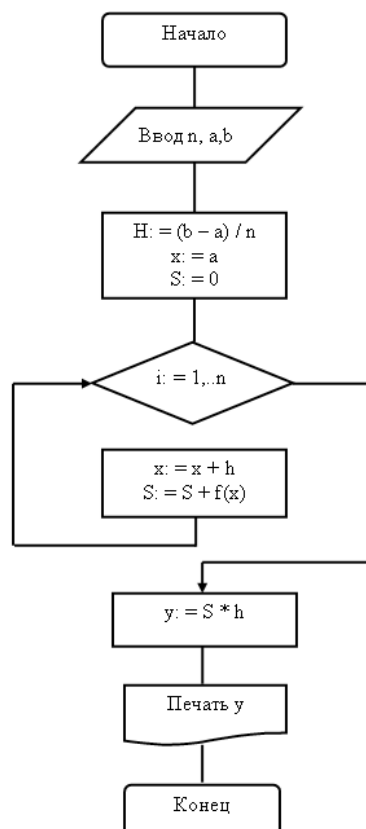
Существуют различные методы для реализации этой проблемы, но наиболее простые:

- методы прямоугольников (левых, правых и средних прямоугольников);
- метод трапеций;
- метод парабол.

Метод прямоугольников — это простой и вместе с тем наиболее грубый метод приближенного интегрирования. Геометрическая интерпретация этого метода выглядит следующим образом:



Построим блок-схему решения метода прямоугольников:



Преподаватель создает проблемную ситуацию, состоящую в нахождении интеграла $\int_0^2 e^{-x^2} dx$. Студенты делают вывод о том, что в этом случае не применимы изученные методы и признают ситуацию проблемной.

Рассмотрим метод «Приближённое вычисление определенных интегралов по формуле правых прямоугольников» на примере интеграла Пуассона, заключённого на отрезке [0;2], т.е. $\int_0^2 e^{-x^2} dx$ и попробуем его приближенно вычислить с помощью электронной таблицы Excel, результат вычислений проанализируем. Для этого вначале отрезок [0;2] разобьём на 20 равных частей, т.е. $a = 0, b = 2, n = 20, h = \frac{b-a}{n} = 0,1$. Создадим таблицу значений

n, x, y , где $x = a + n \cdot h$. Воспользуемся методом правых прямоугольников: $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{n} \cdot (y_1 + y_2 + y_3 + \dots + y_n)$

В электронной таблице создадим таблицы и введем формулы, используя автозаполнение:

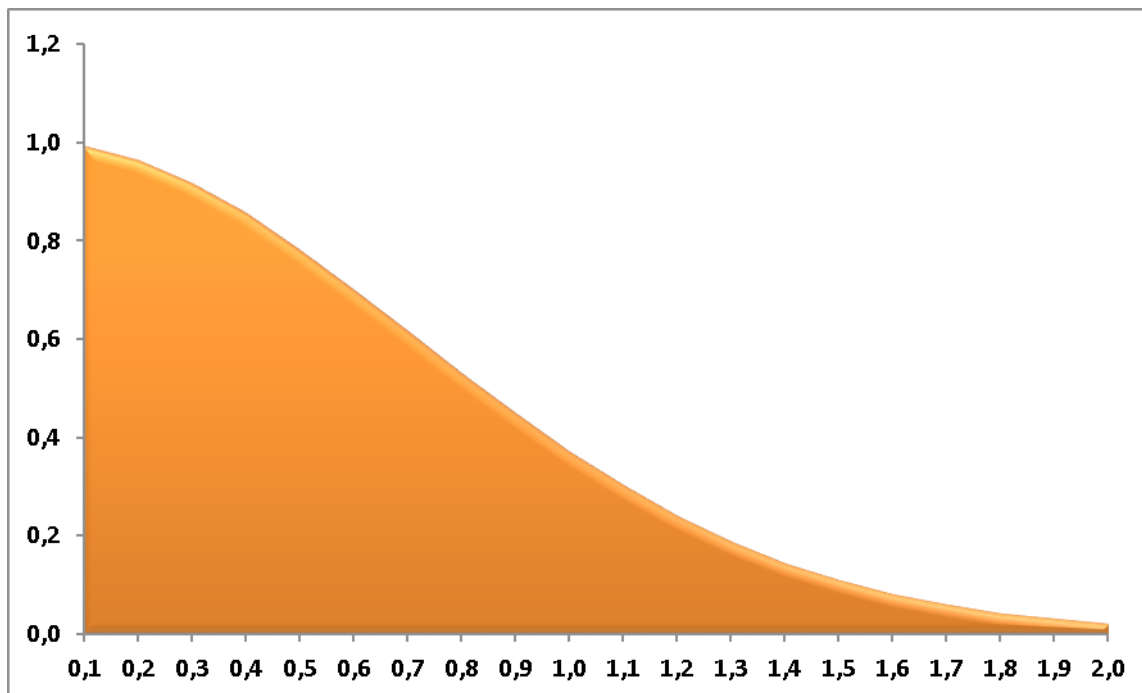
Дано:	
a	0
b	2
n	20
h	0,10

Дано:	
a	0
b	2
n	20
h	=(B3-B2)/B4

n	x	y
1	0,1	0,990
2	0,2	0,961
3	0,3	0,914
4	0,4	0,852
5	0,5	0,779
6	0,6	0,698
7	0,7	0,613
8	0,8	0,527
9	0,9	0,445
10	1,0	0,368
11	1,1	0,298
12	1,2	0,237
13	1,3	0,185
14	1,4	0,141
15	1,5	0,105
16	1,6	0,077
17	1,7	0,056
18	1,8	0,039
19	1,9	0,027
20	2,0	0,018
Приближённое:		0,833
Точное:		0,882
Δ		0,049064
δ		5,56%

n	x	y
1	=\$B\$2+A8*\$B\$5	=EXP (-B8*B8)
2	=\$B\$2+A9*\$B\$5	=EXP (-B9*B9)
3	=\$B\$2+A10*\$B\$5	=EXP (-B10*B10)
4	=\$B\$2+A11*\$B\$5	=EXP (-B11*B11)
5	=\$B\$2+A12*\$B\$5	=EXP (-B12*B12)
6	=\$B\$2+A13*\$B\$5	=EXP (-B13*B13)
7	=\$B\$2+A14*\$B\$5	=EXP (-B14*B14)
8	=\$B\$2+A15*\$B\$5	=EXP (-B15*B15)
9	=\$B\$2+A16*\$B\$5	=EXP (-B16*B16)
10	=\$B\$2+A17*\$B\$5	=EXP (-B17*B17)
11	=\$B\$2+A18*\$B\$5	=EXP (-B18*B18)
12	=\$B\$2+A19*\$B\$5	=EXP (-B19*B19)
13	=\$B\$2+A20*\$B\$5	=EXP (-B20*B20)
14	=\$B\$2+A21*\$B\$5	=EXP (-B21*B21)
15	=\$B\$2+A22*\$B\$5	=EXP (-B22*B22)
16	=\$B\$2+A23*\$B\$5	=EXP (-B23*B23)
17	=\$B\$2+A24*\$B\$5	=EXP (-B24*B24)
18	=\$B\$2+A25*\$B\$5	=EXP (-B25*B25)
19	=\$B\$2+A26*\$B\$5	=EXP (-B26*B26)
20	=\$B\$2+A27*\$B\$5	=EXP (-B27*B27)
Приближённое:		=СУММ (C8: C27) *B5
Точное:		0,882
Δ		=ABS (C29-C28)
δ		=C30/C29

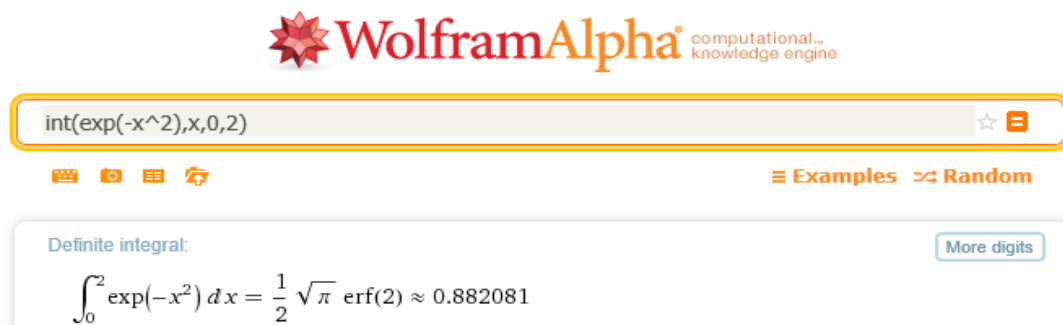
Построим криволинейную трапецию, ограниченной данной функцией, отрезком [0;2] и осью OX, для этого используем вставку диаграммы с областями:



За точное значение примем результат вычисления с помощью математического процессора MathCAD:

$$\int_0^2 e^{-x^2} dx \rightarrow \frac{\sqrt{\pi} \cdot \text{erf}(2)}{2} = 0.882$$

Этот же результат получим с помощью интернет-сервисов на сайте <http://www.wolframalpha.com/>



$A_{\text{точн}} = 0,882$. Вычислим абсолютную и относительную погрешность:

$$\Delta = |A_{\text{точн}} - A_{\text{прибл}}| = |0,833 - 0,882| = 0,0491$$

$$\delta = \frac{\Delta}{|A_{\text{точн}}|} \cdot 100\% = \frac{0,0491}{0,882} \cdot 100\% = 5,56\%$$

Изменим число разбиений отрезка $[0;2]$ на 200 равных частей. Проанализируем точность вычисления интеграла. Для этого изменим данную таблицу.

Дано:

a	0
b	2
n	200
h	0,01

n	x	y
1	0,01	1,000
2	0,02	1,000
3	0,03	0,999
4	0,04	0,998
5	0,05	0,998
6	0,06	0,996
7	0,07	0,995
8	0,08	0,994
9	0,09	0,992
10	0,10	0,990
...
197	1,97	0,021
198	1,98	0,020
199	1,99	0,019
200	2,00	0,018
Приближённое:		0,877
Точное:		0,882
Δ		0,0048
δ		0,55%

Сравнивая полученные результаты таблиц, наглядно видно, что во второй таблице точность вычисления данного интеграла выше, чем в первом случае, относительная погрешность во втором случае составляет менее 1 %, т. е. 0,55 %.

Контрольные вопросы.

1. Как уменьшить погрешность нахождения интеграла в методе прямоугольников?
2. В каких случаях метод прямоугольников находит применение?
3. Можно ли получить методами прямоугольников точное значение интеграла?

Заключение и выводы.

Таким образом, очевидно, что методом прямоугольников при вычислении определенных интегралов не дает нам точного значения, а только приближенное. Следовательно, при увеличении числа разбиений (при уменьшении шага), точность вычислений увеличивается, т. к. уменьшается относительная погрешность. Если точность вычисления интеграла задана, то можно определить, на сколько частей нужно разбить отрезок.

Литература:

1. <http://www.wolframalpha.com/>
2. Алгебра и начала математического анализа. 11 класс. Виленкин Н. Я.
3. Информатика и информационные технологии. Учебник для 10–11 классов. Угринович Н. Д.

Перспективы применения систем иммерсивного телеприсутствия и робототехнических комплексов в системе РСЧС и ГО МЧС России

Горинов Александр Владимирович, студент
Академия гражданской защиты МЧС России (г. Москва)

Ключевые слова: телеприсутствие, система иммерсивной (от англ. Immersive — воздействующий на несколько каналов восприятия) связи, система дистанционного присутствия, система видеоконференс связи, система дистанционной расширенной аудио/видео связи.



В настоящее время огромное значение в системе мероприятий по подготовке к защите и по защите населения, материальных и культурных ценностей от опасностей, возникающих при ведении военных действий или вследствие этих действий, а также при ЧС природного и техногенного характера, короче — в системе мероприятий гражданской обороны, имеет оповещение и информирование населения. Это с особой силой подтвердили события в июле 2012 года в городе Крымске Краснодарского края. Там не только не существовало системы оповещения, но не было даже постановления местной администрации о порядке действий власти в подобных ситуациях.

Все это привело к трагическим последствиям, значительным жертвам среди населения и разрушениям в городе.

Одним из основных условий обеспечения необходимого уровня безопасности населения в мирное время и в особый период является организация, создание и функционирование эффективной системы оповещения населения и органов управления об угрозе и возникновении ЧС.

Оповещение и информирование населения является одной из главных составляющих системы управления и одной из основных задач органов управления всех уровней, организующих защиту в ЧС мирного и военного времени. Она начинается со своевременного оповещения и информирования о возникновении или угрозе возникновения какой-либо опасности.

Цель создания системы оповещения города — обеспечение своевременного доведения сигналов оповещения и информации об опасностях, возникающих при ведении военных действий или вследствие этих действий, а также угрозе возникновения или возникновении ЧС до населения, органов управления городской территориальной подсистемы РСЧС и ГО.

Оповещение начинается с передачи условленных, заранее установленных и предельно понятных населению сигналов оповещения (звук сирены, гудки, частые удары в звучащие предметы и т.д.). После этого необходимо довести информацию об опасности и порядке поведения» в создавшихся условиях, чтобы избежать пора-

жения людей от вредных поражающих факторов при той или иной ЧС.

Потенциально опасные объекты создают локальные системы оповещения, зоны ответственности, которые выходят за пределы этих объектов.

Одна из главных проблем — граждане не знают, что делать в случае возникновения ЧС.

Далее не каждый, услышав вой сирены, устремится к телевизору или радиоприемнику. Да и многие руководители не знают правил поведения при возникновении ЧС.

Все вышесказанное обуславливает актуальность вопросов совершенствования существующих систем оповещения посредством организации системы телеприсутствия.

Бурный рост ИТ-сервисов, сокращение затрат компаний на организацию доступа и аренду широкополосных каналов связи, снижение стоимости телекоммуникационного оборудования сделали сервис видеоконференцсвязи более доступным как для большого, так и для малого бизнеса, а также для частных пользователей.

Технологические решения в области ВКС в настоящее время позволяют организовать интерактивное общение с использованием высококачественного видео/аудио и демонстрацией материалов в FullHD качестве, делают доступным управление видео сервисами даже для неподготовленных пользователей.

Развитие технологий связи позволило организовать доступ в ВКС и через 3G, LTE каналы.

Тенденции сокращения производственных затрат на командировки сотрудников, повышения производительности их труда, сокращения времени, выделяемого на решение различных задач ориентируют частный бизнес, госструктуры, медицинские и образовательные учреждения на использование систем, обеспечивающих интерактивное взаимодействие людей без необходимости их физического присутствия в месте событий.

Системы телеприсутствия для управления силами и средствами в рамках системы оповещения и информирования ГО и РСЧ



Перспективными направлениями развития инфокоммуникационной поддержки деятельности МЧС России при оповещении населения при ЧС и ликвидации последствий стихийных бедствий представляются современные

облачные технологии видеоконференцсвязи с использованием роботов иммерсивного телеприсутствия.

Перспективными направлениями развития технического и инфокоммуникационного обеспечения для управления силами и средствами в рамках системы оповещения и информирования ГО и РСЧ представляется использование различных робототехнических средств.

В настоящее время уделяется внимание развитию робототехнических комплексов на основе использования технологий иммерсивного телеприсутствия, позволяющих проводить как разведку места пожара (происшествия), так и детальный осмотр с фиксацией обстановки и изъятием доказательств (следов, предметов) [1, 2, 3].

Под термином «телеприсутствие» (telepresence) понимается набор технологий, позволяющий пользователю с помощью специальных устройств получить впечатление того, что он находится на месте, отличном от его физического местоположения.

Прилагательное «иммерсивное» (immersive) переводится как «многонаправленный», обозначает одновременное воздействие на пользователя посредством нескольких каналов восприятия (слуха и зрения).

Технологии телеприсутствия представляют собой некий симбиоз технологий видеоконференцсвязи и виртуальной реальности, но имеют существенные отличия от них.

В отличие от традиционной видеоконференцсвязи, системы телеприсутствия могут применяться, когда пользователю необходимо производить некоторый набор активных действий, то есть, в ситуациях, ранее требовавших его личного присутствия.

Системы телеприсутствия и виртуальной реальности используют схожее оборудование для кодирования и передачи информации, а также взаимодействия с пользователем и передачи ему ощущений.

Современные системы виртуальной реальности позволяют пользователю ощутить себя внутри некоторого созданного компьютером виртуального пространства.

Суть телеприсутствия заключается не столько в создании иллюзии нахождения пользователя в другом реальном месте, но и, главным образом, во взаимодействии с реальным миром, включая определённый набор доступных операций с материальными предметами.

Простейшая система включает в себя видеопоток. В идеальном же случае все поле зрения пользователя должно быть заполнено изображением удалённого места.

Для достижения подобного эффекта могут использоваться очень большие (в том числе сферические) экраны или же миниатюрные дисплеи, закреплённые перед глазами.

В этом случае можно добиться особо убедительного чувства объёма. Точка обзора (камера на удалённой площадке) должна соответствующим образом реагировать на перемещение и повороты головы пользователя, воспроизводить их точно и в реальном времени.

Важнейший компонент системы телеприсутствия — возможность манипулировать объектами в удалённой среде — может быть реализована, например, при считывании

вании перчатками или иными системами отслеживания положения движения рук и пальцев пользователя и точным копированием их находящимся в удалённом месте роботом.

Роботов на основе технологий телеприсутствия для различных видов деятельности разрабатывали многие мировые компании, но все их проекты так или иначе остались на уровне опытных образцов.

В первую очередь, серийное производство сталкивалось с проблемой высокой стоимости подобных устройств.

Поэтому, несмотря на долгую историю развития, роботы телеприсутствия разрабатывались в основном для военных целей.

Большинство существующих боевых роботов используют технологии телеприсутствия — беспилотные летательные аппараты, роботы для разминирования.

Также технологии телеприсутствия применяются в роботах для подводных работ, на объектах атомной энергетики и ядерной промышленности, в горном деле.

Высокая цена систем телеприсутствия обусловлена применением дорогого оборудования (кодеки, специальные дисплеи и т. п.) и необходимостью унификации помещений для проведения сеансов видеоконференцсвязи.

Необходимо также иметь высокоскоростные каналы передачи данных (от несколько десятков до несколько сот Мбит/с), способные обеспечить многоканальную передачу видео в HD-качестве.

Наблюдается быстрое удешевление как аппаратных средств, так и трафика передачи данных, снимающее существующие до настоящего времени ограничения развития технологий телеприсутствия.

Эти тенденции развития инфокоммуникационных средств позволяют прогнозировать в ближайшем будущем создание новых образцов робототехники на основе телеприсутствия и их распространение в различные сферы деятельности — промышленное производство, образование, медицину и пр.

Внедрение технологий иммерсивного телеприсутствия создаёт технические предпосылки для построения на их основе систем дистанционного взаимодействия [2] государственного инспектора по пожарному надзору, спасателя, других специалистов МЧС России с различными специалистами смежных ведомств в ходе осмотра места ЧС и проведения мероприятий по надзору, ликвидации последствий, отслеживании динамики стихийных бедствий.

Заключение



Имеющиеся средства РСЦО не позволяют в полном объёме осуществить прикрытие населения области средствами оповещения.

Охват населения электросиренами составляет в среднем — 66,5%, проводным вещанием в среднем — 1,1%, радиовещанием в среднем — 81,2%, телевещанием в среднем — 86,1%.

В целом, средствами РСЦО охвачено 77% от общей численности населения областей при анализе в среднем по стране. В городах средствами оповещения охвачено от 89 до 95% населения.

Увеличение охвата населения средствами оповещения можно достичь внедрением сегмента Общероссийской комплексной системы информирования и опо-

вещения населения в местах массового пребывания людей.

Для информирования и обучения населения в области безопасности жизнедеятельности используются возможности технических средств оповещения частных предпринимателей, с которыми заключены договоры на использование оборудования в зданиях железнодорожного вокзала, автовокзала, сети супермаркетов.

Имеются договоры с организациями на размещение информации пропагандистского характера в интересах МЧС России на светодиодных экранах и региональном прокате 1 и 2 канала телевидения.

Внедрение современных средств оповещения, в частности оснащение штабов ГО, мест базирования ПСО и ПЧ, местной администрации и смежных ведомств системами иммерсивного телеприсутствия позволит в дальнейшем интегрировать данную систему в комплексную систему экстренного оповещения населения об угрозе возникновения или о возникновении чрезвычайной ситуации. А применение робототехнических средств, оснащенных системами телеприсутствия, позволит существенно поднять скорость и качество прогнозирования и ликвидации последствий ЧС и стихийных бедствий.

Литература:

1. Прус, Ю. В., Битуев Б. Ж., Белозёров В. В., Шаповалов В. М. Базовые системы инфокоммуникационного обеспечения — основа создания «виртуального штаба» при пожарах и ЧС // Технологии техносферной безопасности: интернет-журнал. 2008. №5. [http://ipb.mos.ru/ttb.](http://ipb.mos.ru/ttb;);
2. Прус, Ю. В., Битуев Б. Ж., Белозёров В. В., Шаповалов В. М., Мирзоев М. А. Организация межведомственного взаимодействия при чрезвычайных ситуациях на основе инфотелекоммуникационных систем «виртуального штаба» // Сб. тр. 18-й междунар. конф. «Информатизация и информационная безопасность правоохранительных органов». М.: Академия управления МВД России, 2009. с. 147–151.;
3. Прус, Ю. В., Шаповалов В. М., Битуев Б. Ж., Крылов А. М. Инфокоммуникационное пространство территориальной системы безопасности // Труды 18-й междунар. конф. «Проблемы управления безопасностью сложных систем». М.: РГГУ, 2010. с. 187–191.

Реализация численного алгоритма метода вариаций в пространстве управлений

Григорьев Игорь Владимирович, магистрант;

Мустафина Светлана Анатольевна, доктор физико-математических наук, профессор
Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета

В статье разработан алгоритм и реализована программа решения задачи оптимального управления на основе метода вариаций. Реализованный алгоритм был апробирован на тестовых примерах.

Ключевые слова: метод вариаций, оптимальное управление, численное решение.

Введение. Задачи оптимального управления встречаются в различных сферах человеческой деятельности. Каждое разумное действие является в определенном смысле и оптимальным, ибо оно, как правило, выбирается после сравнения с другими вариантами. Интерес к задачам наилучшего выбора был высоким всегда, но особенно возрос в последние годы в связи с интенсивным развитием науки и техники. В связи с этим возникает проблема выбора из множества вариантов решения задачи того, который обеспечивает наилучшее или наиболее эффективное распределение ресурсов. Этот наилучший вариант и называется оптимальным. Выбор оптимального варианта определяется каким-либо показателем, который называется критерием оптимизации.

Постановка задачи. Пусть управляемый процесс представлен системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, \dots, x_n, u_1, \dots, u_r, t), \quad (1)$$

где x_i — фазовые переменные, а u_j — переменные управления, $u_j \in U$.

При $t = 0$ заданы все начальные значения фазовых переменных x_i :

$$x_i(0) = x_{i0}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2)$$

На управление и фазовые переменные наложены ограничения типа:

$$\eta(u_1, \dots, u_r) \leq 0, \theta(x_1, \dots, x_n) \leq 0. \tag{3}$$

Область, ограниченную неравенством для управлений в пространстве переменных u_1, \dots, u_r , будем называть допустимой областью U .

Критерий оптимизации пусть задан в терминальном виде:

$$I(x_1(T), \dots, x_p(T)) \rightarrow \min, p \leq n. \tag{4}$$

Требуется найти такое управление $u(t)$, удовлетворяющее условиям (3), чтобы величина $I(x_1(T), \dots, x_p(T))$ приняла минимальное значение.

Для численного решения данной задачи был составлен алгоритм метода вариации в пространстве управлений:

1. Интегрируя систему (1) при $u = u^k(t)$ с начальными условиями (2) в интервале $0 \leq t \leq T$, вычисляем значение критерия I . Запоминаем значение критерия и управление в достаточном числе точек.

2. Варьируем управление по направлениям $u^k \pm \delta u$ в точке $t = t_i$. Интегрируем систему (1) при $u = u^k(t) \pm \delta u$ с начальными условиями (2) в интервале $0 \leq t \leq T$, вычисляем значение критерия I . Если критерий улучшился, и при этом выполняются условие (3), то запоминаем это значение критерия и управление в достаточном числе точек.

3. Переходим к следующей точке $t = t_{i+1}$ и выполняем п.2 со «старым» приближением u^k . После того, как пробежим все точки отрезка $0 \leq t \leq T$, переходим к u^{k+1} . Повторяем цикл до тех пор, пока не выполнится условие $\delta u < \varepsilon$. Если критерий на отрезке $0 \leq t \leq T$ не улучшился, то уменьшаем вариацию вдвое, т. е. $u^k \pm \frac{\delta u}{2}$.

Тестирование алгоритма. На основе созданного алгоритма реализована программа. Рассмотрим работу полученного алгоритма на следующих примерах. Для вычисления погрешностей будем использовать евклидову норму:

$$\varepsilon_{x_1} = \sqrt{\sum_i (x_{1i} - x_1^*(t_i))^2}; \quad \varepsilon_{x_2} = \sqrt{\sum_i (x_{2i} - x_2^*(t_i))^2}; \quad \varepsilon_u = \sqrt{\sum_i (u_i - u^*(t_i))^2}.$$

Пример 1. Допустим, что некоторый процесс описывается системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{x}_1(t) = x_2(t), \\ \dot{x}_2(t) = -x_1(t) + u(t); \end{cases} \tag{5}$$

с начальными условиями:

$$x_1(0) = 0, \quad x_2(0) = 0 \tag{6}$$

и следующими ограничениями на переменную времени:

$$0 \leq t \leq 2\pi \tag{7}$$

и на управление:

$$|u| \leq 1. \tag{8}$$

Критерий оптимизации имеет вид

$$I(x_1, x_2) = x_2(2\pi) \rightarrow \min. \tag{9}$$

Требуется найти оптимальное программное управление $u^*(\cdot)$ и соответствующую ему траекторию $x^*(\cdot)$, которые удовлетворяют уравнениям (5)-(6), ограничениям (7)-(8) и условию (9).

Аналитическое решение данной задачи представлено в [2].

На рис. 1 — рис. 2 изображено численное решение данной задачи, при начальном приближении $u_0 = 0.3$.

Сравнивая полученные численные и аналитические значения, вычислим погрешности для управления и траекторий.

$$\varepsilon_{x_1} = 0.053; \quad \varepsilon_{x_2} = 0.064; \quad \varepsilon_u = 2.023.$$

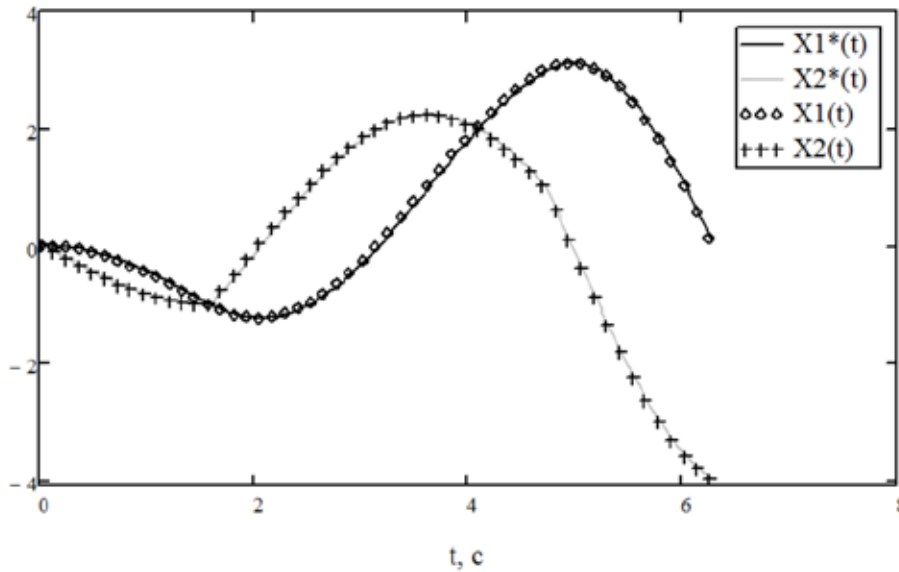


Рис. 1. Графики оптимальных траекторий для примера 1

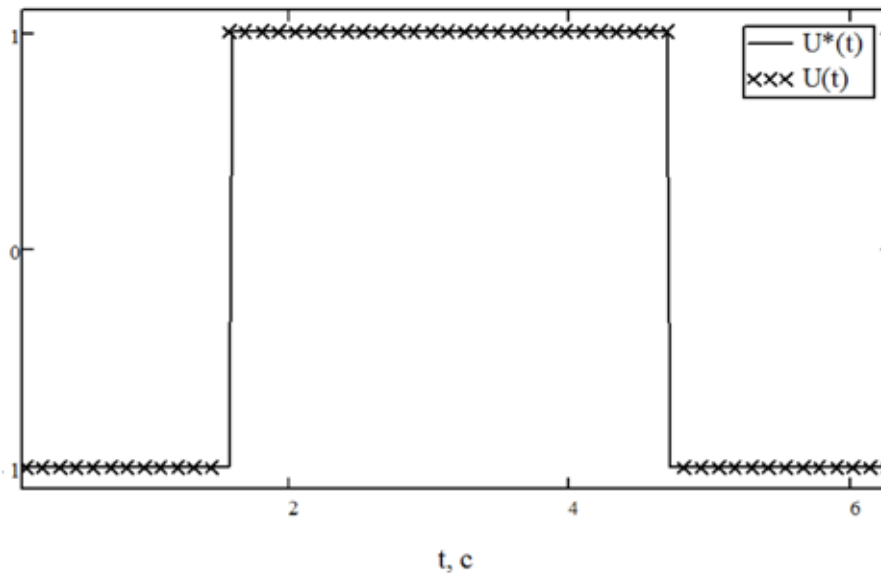


Рис. 2. График оптимального управления для примера 1

Пример 2. Пусть управляемый процесс описывается системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{x}_1(t) = x_2(t), \\ \dot{x}_2(t) = u(t); \end{cases} \tag{10}$$

с начальными условиями:

$$x_1(0) = -1, x_2(0) = 0 \tag{11}$$

и следующими ограничениями на переменную времени:

$$0 \leq t \leq 2.5 \tag{12}$$

и на управление, фазовые переменные:

$$|u| \leq 1, x_2 \leq 0.5. \tag{13}$$

Критерий оптимизации имеет вид

$$I(x_1, x_2) = x_1^2(2.5) + x_2^2(2.5) \rightarrow \min. \tag{14}$$

Требуется найти оптимальное программное управление $u^*(\cdot)$ и соответствующую ему траекторию $x^*(\cdot)$, которые удовлетворяют уравнениям (10)-(11), ограничениям (12)-(13) и условию (14).

Аналитическое решение данной задачи представлено в [1].

На рис. 3 — рис. 4 изображено численное решение данной задачи, при начальном приближении $u_0 = 0.1$.

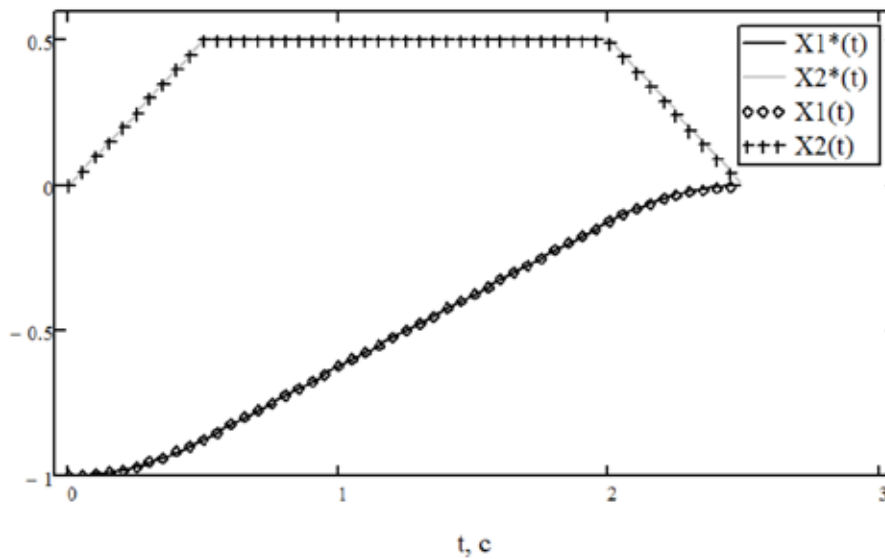


Рис. 3. Графики оптимальных траекторий для примера 2

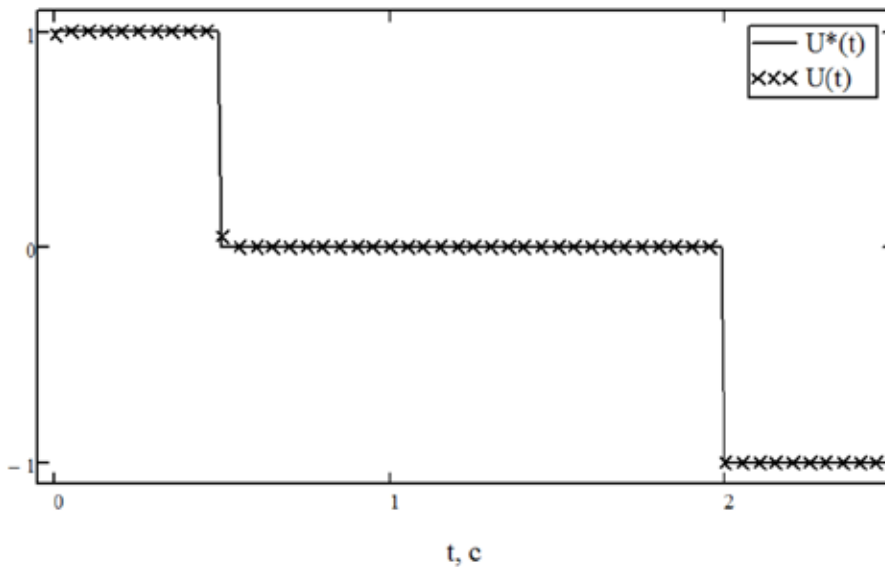


Рис. 4. График оптимального управления для примера 2

Сравнивая полученные численные и аналитические значения, вычислим погрешности для управления и траекторий.

$$\varepsilon_{x_1} = 0.021; \varepsilon_{x_2} = 0.062; \varepsilon_u = 0.778.$$

Пример 3. Пусть управляемый процесс описывается системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{x}_1(t) = x_2(t), \\ \dot{x}_2(t) = u^2(t) - 0.5 \cdot u(t); \end{cases} \quad (15)$$

с начальными условиями:

$$x_1(0) = 0, x_2(0) = 0 \quad (16)$$

и следующими ограничениями на переменную времени:

$$0 \leq t \leq 1 \quad (17)$$

и на управление:

$$0 \leq u \leq 1. \quad (18)$$

Критерий оптимизации имеет вид

$$I(x_1, x_2) = x_1(1) \rightarrow \max. \quad (19)$$

Требуется найти оптимальное программное управление $u^*(\cdot)$ и соответствующую ему траекторию $x^*(\cdot)$, которые удовлетворяют уравнениям (15)-(16), ограничениям (17)-(18) и условию (19).

Аналитическое решение данной задачи представлено в [1].

На рис. 5 изображено численное решение данной задачи, при начальном приближении $u_0 = 0.6$.

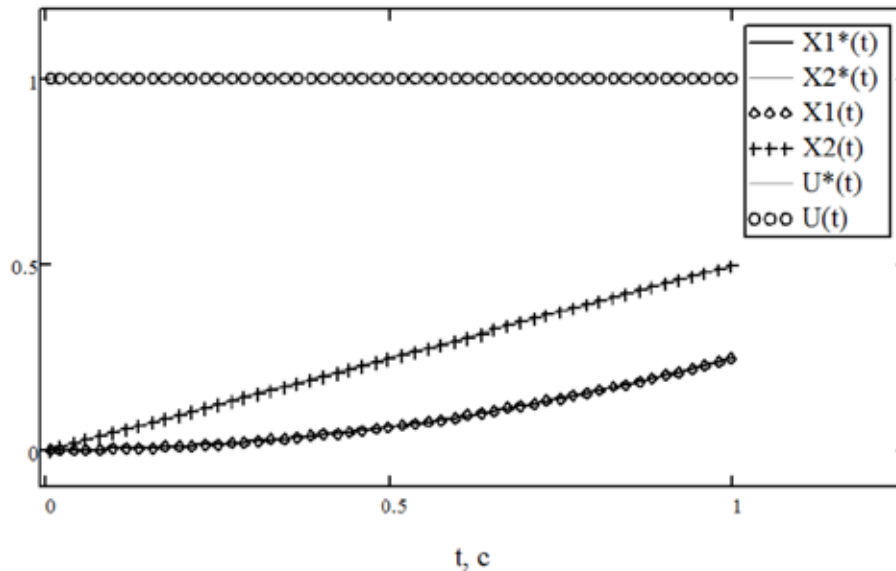


Рис. 5. Графики численного решения примера 3

Сравнивая полученные численные и аналитические значения, вычислим погрешности для управления и траекторий.

$$\varepsilon_{x_1} = 0.0004; \quad \varepsilon_{x_2} = 0.0012; \quad \varepsilon_u = 0.0014.$$

Выполненный сравнительный анализ приближенного и аналитического решения задач показал их удовлетворительное согласование между собой.

Литература:

1. Островский, Г.М., Волин Ю.М. Методы оптимизации сложных химико-технологических схем. — М.: Химия. 1970. 328 с.
2. Понтрягин, Л.С. Математическая теория оптимальных процессов. — М.: Наука. 1976. 392 с.
3. Мустафина, С.А., Валиева Ю.А., Давлетшин Р.С., Балаев А.В., Спивак С.И. Оптимальные технологические решения для каталитических процессов и реакторов // Кинетика и катализ. 2005. Т. 46. №5. с. 749—756.
4. Мустафина, С.А., Балаев А.В., Смирнов Д.Ю., Спивак С.И. Моделирование каталитического процесса дегидрирования метилбутенов // Системы управления и информационные технологии. 2006. Т. 23. №1. с. 10—14.
5. Федоренко, Р.П. Приближенное решение задач оптимального управления. — М.: Наука. 1978. 488 с.

Этапы и тенденции развития геоинформационных систем

Дупленко Александр Геннадьевич, программист
НОУ «Учебный центр Олега Видякина» (г. Калининград)
МАОУ Гимназия №1 (г. Калининград)

В статье представлены результаты исследования тенденций развития геоинформационных систем (ГИС). Рассмотрены этапы развития геоинформационных технологий, компании-лидеры в разработке ГИС, развитие геоинформационных технологий в России. Проведен сравнительный анализ двухмерных и трехмерных геоинформационных систем.

Ключевые слова: географическая информационная система, геоинформационные технологии, геоинформационная система, ГИС.

Понятие «географическая информационная система» (ГИС) возникло сравнительно недавно. Под ГИС понимается, как правило, совокупность программного и аппаратного обеспечения, информации соответствующего назначения и средств ее визуализации. Основными функциями ГИС являются определение точного местоположения объекта в пространстве; визуализация информации с привязкой к местности для принятия управленческих решений; мониторинг природных ресурсов и экологической ситуации, планирование развития инфраструктуры и т.д. [3, с. 15]

Первые геоинформационные технологии были разработаны в конце 1950-х — 1960-х годах в Западной Европе, США и Канаде. Это был *первый этап развития ГИС*. К числу главных достижений этого периода в теории ГИС можно отнести определение принципиальных возможностей геоинформационных систем, в практической сфере — разработку первых крупных ГИС.

Самой масштабной и успешной из них была Canada Geographic Information System (CGIS) — Географическая Информационная Система Канады, разработанная под руководством известного английского географа Роджера Томлинсона (Roger Tomlinson). Задачами данной ГИС были картографирование земельных ресурсов Канады с их последующей классификацией.

Большой вклад в развитие геоинформационных технологий в данный период внесла также основанная Говардом Фишером (Howard Fisher) в Массачусетском технологическом институте Harvard Laboratory for Computer Graphics & Spatial Analysis — Гарвардская лаборатория компьютерной графики и пространственного анализа. Специалисты этой лаборатории занимались разработкой программного обеспечения для многофункционального компьютерного картографирования.

Вторым этапом развития ГИС стал период с начала 1970-х до начала 1980-х годов. Проектирование геоинформационных систем оказалось очень затратным, и роль отдельных исследователей в этой области заметно снизилась. Одновременно возросла роль финансируемых государством крупных институтов. Был реализован целый ряд масштабных геоинформационных проектов. Наиболее известным из них является проведение переписи населения Национальным Бюро Переписей США в 1970 году с ис-

пользованием специального топологического подхода к организации управления географической информацией на основе формата представления картографических данных Dual Independent Map Encoding (DIME).

Если первый этап развития геоинформационных систем многие называют пионерным, то второй — этапом государственных инициатив [8].

Третий период развития ГИС начался в 1980-х годах и, по мнению многих специалистов, продолжается по настоящее время. Его основной чертой стало бурное развитие корпоративных и распределенных бах геоданных на основе коммерциализации геоинформационных технологий, интеграции ГИС и СУБД, а также разработки сетевых приложений. Большую роль в этом сыграло создание формата ARC/INFO.

Широкое распространение ГИС и их активная разработка привели к значительному усилению конкуренции на рынке геоинформационных продуктов, активизации исследований по их дальнейшему совершенствованию. Одновременно начались процессы глобализации геоинформационной инфраструктуры. Многие специалисты выделяют называют этот этап пользовательским периодом, так как рынок геоинформационных продуктов превратился в так называемый рынок покупателя, когда возросшая конкуренция приводит к тому, что главную роль на рынке начинает играть покупатель, его предпочтения и потребности [8].

Большую роль в активизации разработки геоинформационных технологий сыграло появление бесплатных ГИС. В их числе стоит отметить, в первую очередь, Geographic Resources Analysis Support System (GRASS), которая была разработана по заказу военного ведомства США, но в 1994 году была открыта для бесплатного пользования, и ее активно стали применять частные компании, отдельные программисты и пользователи для решения задач, связанных с планированием землеустройства и природопользования, разработки собственных приложений. В тот же год открыла для неограниченного бесплатного пользования программный продукт «ArcView 1 for Windows» и корпорация Environmental Systems Research Institute, Inc. (ESRI), США.

В 1980-е годы появились такие лидеры индустрии ГИС, как Autodesk (1982 год), специализирующаяся на про-

граммных продуктах для машиностроения, промышленного и гражданского строительства; Bentley Systems, Inc. (1984 г.), специализирующаяся на комплексных ГИС-СА-ПР-технологиях; MapInfo Corporation (1986 год), геоинформационные системы которой являются в настоящее время самыми распространенными в России.

В середине 1980-х годов собственные ГИС начали разрабатываться и в Советском Союзе, однако широкого распространения они получить не успели. В начале 1990-х годов в России впервые появились и сразу завоевали рынок, в том числе в нефтегазовой сфере и в секторе телекоммуникационных систем, ГИС зарубежных производителей.

Впоследствии развитие геоинформационных технологий в России сдерживалось законодательными запретами на использование картографических данных в открытом доступе, а также низкой покупательной способностью не только населения, но и компаний, которые хотели бы использовать в своей деятельности ГИС. В результате государственной поддержки в рамках целевых программ удалось переломить ситуацию с разработкой крупных региональных геоинформационных систем. Были разработаны и успешно функционируют такие ГИС, как Единое геоинформационное пространство г. Москвы, Региональная геоинформационная система Московской области, Геоинформационная система Санкт-Петербурга, Региональная инфраструктура на территорию Калужской области, ГИС в территориальном планировании Ростовской области и многие другие [1, с. 276].

В настоящее время ГИС наиболее активно используются в нефтегазовой и телекоммуникационной отраслях, а также органами административно-территориального управления на региональном и национальном (федеральном) уровнях. Разумеется, этими сферами их использование не ограничиваются. Разработаны эффективные геоинформационные продукты и для решения множества других задач — в агропромышленном комплексе и лесном хозяйстве, в сфере инженерных коммуникаций, в банковской сфере, маркетинге, здравоохранении, в транспортном и дорожном хозяйстве, машиностроении [6, с. 110], для оценки региональной социально-экономической асимметрии и т.д. [4, с. 162; 5, с. 21] Можно сказать, что геоинформационные технологии используются в настоящее время практически во всех сферах человеческой деятельности.

По некоторым подсчетам, общее количество разработанных к настоящему времени ГИС-пакетов насчитывает сотни единиц, а созданных на их основе геоинформационных систем — десятки тысяч [2, с. 91].

Литература:

1. Бешенцев, А. Н. Геоинформационный мониторинг трансграничных социально-экономических процессов // Трансформация социально-экономического пространства Евразии в постсоветское время Быков Н. И., Дирин Д. А., Мадры Ц. М. Министерство образования и науки РФ, Алтайский государственный университет, Университет им. Адама Мицкевича, Институт региональной географии им. Лейбница. Барнаул, 2014. с. 275–281.
2. Демиденко, А. Г. Тенденции развития ГИС на примере продуктов КБ «Панорама» // GEOMATICS. 2010. №3. с. 91–96.

Это одна из перспективнейших технологий, которая активно развивается и совершенствуется, что обусловлено объективными причинами. Подсчитано, что свыше 60 процентов совокупной информации, которая содержится в корпоративных базах данных, имеет пространственную привязку. В целом же ее имеет более 70 процентов всей информации, которую использует человек [7].

Одним из направлений развития геоинформационных технологий является переход от двухмерных к трехмерным ГИС, что обусловлено недостатками ставших классическими двухмерных систем. Во-первых, они характеризуются сложностью и трудоемкостью одновременного представления нескольких вариантов планировочного решения; во-вторых, при пересечении объектов, нахождении их друг над другом затруднен поиск объектов, переход от одного объекта к другому; в-третьих, невозможно пространственно анализировать объект с разных точек обзора. Существуют и другие недостатки.

С целью их устранения и разрабатываются трехмерные ГИС, что стало возможным с развитием технологий визуализации, моделирования и повышением быстродействия вычислительной техники.

Трехмерные ГИС, в отличие от двухмерных, позволяют создавать более удобные для анализа визуализации ландшафта, зданий и сооружений, инфраструктуры от нескольких десятков метров до сотен километров, анализа взаимодействия объектов друг с другом и с окружающим пространством. Их неоспоримым преимуществом является также возможность фотореалистичной визуализации проектов застройки территории или отдельных объектов.

Таким образом, тенденциями развития ГИС в настоящее время являются следующие.

Во-первых, увеличение количества разработчиков ГИС и самих геоинформационных продуктов, насыщение рынка ГИС и острая конкуренция на нем.

Во-вторых, широкое распространение ГИС — они проникли практически во все отрасли человеческой деятельности.

В-третьих, все более активное использование территориальных ГИС — первоначально на региональном и федеральном, а теперь и муниципальном уровне.

В-четвертых, начало процессов глобализации ГИС.

В-пятых, переход геоинформационных систем от двухмерного проектирования к трехмерному моделированию, все более широкое использование трехмерных ГИС.

3. Дударева, О. В., Королёва А. В. Геоинформационный анализ: учебное пособие / Иркутский государственный технический университет. Иркутск, 2013.
4. Дупленко, Н. Г. Асимметрия развития малого и среднего предпринимательства на региональном уровне // Вестник Балтийского федерального университета им. И. Канта. 2013. №9. с. 160–163.
5. Дупленко, Н. Г., Пурыжова Л. В. Асимметрия потенциала социально-экономического развития муниципальных образований региона на примере Калининградской области // Молодой ученый. 2014. №19–1. с. 19–24.
6. Дупленко, Н. Г., Харичкова Е. В. Формирование системы распределения продукции машиностроительного предприятия // Управление каналами дистрибуции. 2011. №2. с. 108–125.
7. Емельянова, Г. ГИС сегодня: тенденции, обзор // Сайт «Isicad: окно в мир САПР», 20.11.2012/URL: http://isicad.ru/ru/articles.php?article_num=15737 (дата обращения: 11.02.2015)
8. История развития геоинформационных систем // Сайт «Геоинформационные системы (ГИС)», 2014. URL: <http://kartaplus.ru/gis2> (дата обращения: 14.02.2015)

Нечеткие алгоритмы оценки физической и технической защищенности объектов распределенного предприятия

Елезов Данила Александрович, аспирант;
Тупицин Александр Владимирович, кандидат технических наук, преподаватель
Вологодский государственный университет

Нарушение безопасности предприятия является одной из наиболее распространенных причин осуществления противоправных действий. Успешность противодействия противоправным действиям определяется возможностью ее дифференциальной диагностики, то есть отнесения к одному из определенных состояний объекта. Качество диагностики сильно зависит наличия специализированных технических средств и квалифицированного персонала. Это обуславливает актуальность создания компьютерной диагностической системы поддержки принятия решений обеспечения безопасности.

В настоящее время используется и разрабатывается много информационных систем, методов и средств контроля и диагностики состояния защищенности предприятия. Вместе с тем необходимо совершенствование существующих и разработка новых технологий и практических методов, которые обеспечивали бы более эффективное обслуживание, сопровождение и модернизацию по техническому состоянию объекта.

Основным направлением, определяющим повышение качества информационных технологий контроля и оценки технического состояния, следует считать интеллектуализацию процессов обработки диагностической информации с использованием технологии экспертных систем, которые способны обеспечить повышение качества распознавания технического состояния и ресурса объекта.

Наиболее перспективным направлением для решения задач оценки защищенности объектов, учитывая объективно существующую неопределенность, неоднозначность, неполноту и нечеткость информации об объекте, при разработке базы знаний и механизмов вывода экспертных систем является использование аппарата нечеткой логики, позволяющего объективно оценивать состояние защищенности и более обоснованно принимать решения по управлению безопасностью предприятия.

Решение задачи начинается с построения системной и математической моделей.

С целью получения исходных данных для построения модели оценки состояния системы физической безопасности объектов предприятия, приближенной к реальным производственным условиям, применим системный подход к прогнозированию.

Системный подход к прогнозированию подразумевает определение факторов, действующих на объект прогноза, и оценку их влияния на прогнозируемый показатель.

На начальном этапе известны только входные и выходные параметры модели, которые стоит описать с помощью подхода с позиции «чёрного ящика».

Математическое описание такой системы выражается зависимостью:

$$Y = f(X, A, \varepsilon) \tag{1}$$

Оценку состояния объекта предприятия целесообразно проводить в статическом режиме, полагая, что все значимые переменные находятся в установившемся состоянии. Предлагается использовать автоматическое определение состояния, построенного на основе нечетких алгоритмов, позволяющего на основе состояний подсистем безопасности x_i отнести объект защиты к одному из классов защищенности (d_1, \dots, d_k).

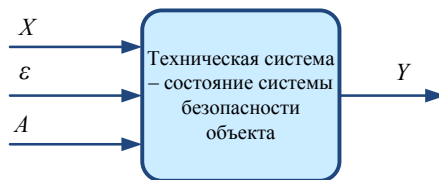


Рис. 1. Модель системы оценки безопасности предприятия в форме «черный ящик»

Таблица 1. Факторы для объекта прогнозирования

Фактор	Описание	Фактор для системы оценки состояния безопасности объекта
X	Возмущения — контролируемые переменные, их значения можно изменять	Время эксплуатации, время отказа системы, количество аварий и отказов, физические характеристики технических устройств, и др.
ε	Помехи или «шум» — неконтролируемые переменные, если для их измерения не существует методик и приборов	Невидимые неисправности, отклонения, сбои, человеческий фактор и др.
A	Управляемые переменные — можно измерять их значения, одновременно и управляющие переменные — т. к. изменяя их значения, можно влиять на работу объекта	Параметры процесса осуществления безопасности, настройки оборудования, температура, влажность, контроль за исправностью элементов системы, наличие планово — предупредительных ремонтов, регламентных работ и др.
Y	Целевой выход, соответствующий цели исследования	Комплексный показатель безопасности объекта

Модель оценки состояния защищенности объекта предприятия является статической и ее можно выразить в следующей общей форме:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_n), \tag{2}$$

где x_i – входные переменные, оказывающие наиболее существенные факторы на защищенность объекта. Оценка состояния объекта происходит путем обработки информации о входных параметрах x_i , (i — количество переменных) с помощью аппарата нечеткой логики.

Построение модели сводится к определению структуры, заданию нечетких множеств, заданию функций принадлежности, выбору алгоритма расчета нечеткого вывода.

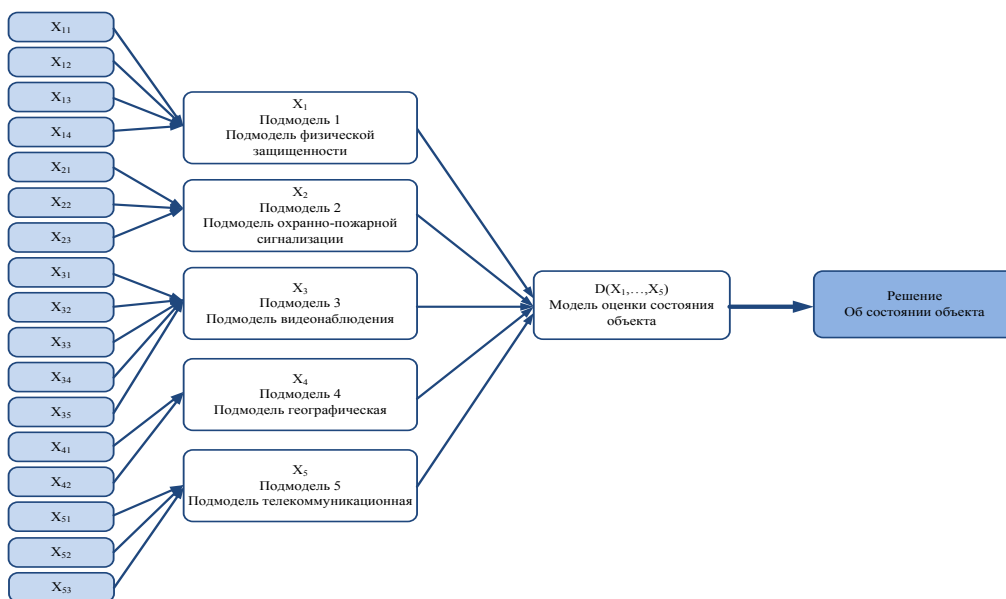


Рис. 2. Модель оценки состояния безопасности объекта

Однако при наличии большого числа входных параметров x_i для оценки технического состояния защищенности целесообразно определить структуру модели и выделить подмодели (Рис. 2). Создав тем самым иерархическую многоуровневую структуру, состоящая из системы вложенных друг в друга нечетких баз знаний меньшей размерности, в которой связь между входными переменными x_i ($i=1, n$), которые отнесены к подмоделям X_j ($j=1, m$) и выходной переменной D_j ($j=1, k$) описывается системой соотношений [1]:

$$\begin{aligned} X_1 &= F_{X_1}(x_1, \dots, x_k) \\ X_2 &= F_{X_2}(x_{k+1}, \dots, x_p) \\ X_m &= F_{X_m}(x_q, \dots, x_m) \\ D &= F_D(X_1, \dots, X_n) \end{aligned} \tag{3}$$

Каждая подмодель X_j осуществляет расчет показателей надежности входящих в нее элементов x_i на основе совокупности параметров. Механизм обработки информации для подмоделей идентичен, отличается набором блоков в связи с различной структурой схем обработки информации.

Входные параметры нечеткой модели с помощью фаззификации представлены в виде лингвистических переменных x_i , заданных на универсальных множествах при помощи терм-множеств T_j , характеризующихся функциями принадлежности $X_j^{\theta}(x_i)$ (j — количество термов (нечетких множеств) лингвистической переменной, θ — количество правил).

Переменные входящие в систему уравнений (1) являются лингвистическими со следующими термами:

- (D_1, \dots, D_n) — множество термов для оценки переменных классов состояний D ;
- $(A_{11}, \dots, A_{1k}, \dots, A_{l1}, \dots, A_{lm})$ — множество термов для оценки переменных параметров состояния подмодели X ;
- $(a_{11}, \dots, a_{1p}, \dots, a_{q1}, \dots, a_{qw})$ — множество термов для оценки входных переменных состояния x_i .

В настоящее время для целей моделирования и прогнозирования широко используются различные по структуре нечеткие модели, например, состоящие из совокупности продукционных правил, в правой части которых находятся константы, нечеткие множества (схема Мамдани). В общем виде нечеткий логический вывод по алгоритму Мамдани выполняется по нечеткой базе знаний [1]:

$$\bigcup_{p=1}^{k_j} [\bigcap_{i=1}^n (x_i = a_i^{jp} W_{jp}^A)] \rightarrow X_j = A_{1j}, j = \overline{1, m} \tag{4}$$

Для соотношений (3) нечеткая модель оценки защищенности запишется в виде уравнений:

$$\begin{aligned} \bigcup_{p=1}^{1k_j} \left[\bigcap_{i=1}^l (x_i = a_i^{jp} W_{jp}^{\square}) \right] &\rightarrow X_1 = A_{1j}, j = \overline{1, f_1} \\ \bigcup_{p=1}^{mk_j} \left[\bigcap_{i=1}^n (x_i = a_i^{jp} W_{jp}^A) \right] &\rightarrow X_m = A_{mj}, j = \overline{1, f_m} \\ \bigcup_{p=1}^{k_j} \left[\bigcap_{i=1}^m (X_i = A_i^{jp} W_{jp}^D) \right] &\rightarrow D, j = \overline{1, k} \end{aligned} \tag{5}$$

Здесь W_{jp}^A, W_{jp}^D — веса правил (коэффициенты доверия), представляющие собой числа из диапазона $[0, 1]$ и характеризующих степень уверенности эксперта в этом правиле.

Основной характеристикой лингвистических переменных и нечетких множеств является функция принадлежности; вычисления на нечетких множествах более простые, чем статистические расчеты (используются в основном две операции: минимизации и максимизации). Уравнениям (5) соответствуют нечеткие логические уравнения, связывающие функции принадлежности нечетких термов входных и выходных переменных:

$$\mu^{A_{1j}}(x_1, \dots, x_n) = \max_{p=1, 1k_j} \left\{ W_{jp}^A \left(\min_{i=1, l} \left[\mu^{a_i^{jp}}(x_i) \right] \right) \right\}, j = 1, g_1 \tag{6}$$

$$\mu^{A_{mj}}(x_1, \dots, x_n) = \max_{p=1, m, k_j} \left\{ W_{jp}^A \left(\min_{i=r+1, m} \left[\mu^{A_i^{jp}}(x_i) \right] \right) \right\}, j = 1, G_m$$

$$\mu^{D_j}(X_1, \dots, X_n) = \max_{p=1, k_j} \left\{ W_{jp}^D \left(\min_{i=1, m} \left[\mu^{A_i^{jp}}(X_i) \right] \right) \right\}, j = 1, k$$

В связи с возможным недостатком информации об особенностях функций принадлежности нечетких переменных при построении нечеткой модели конкретного элемента системы их характер может быть уточнен и учтен на этапе идентификации нечеткой модели.

Определение класса защищенности с использованием иерархической схемы нечеткого логического вывода выполняются по следующему алгоритму:

1. Определяют множество классов состояний объекта, множество признаков состояния объекта; разрабатывают нечеткую базу знаний, с использованием которой выполняется оценка состояния подсистем;
2. Для заданного набора значений входных переменных определяют значения функции принадлежности нечетким термам входных переменных;
3. Используя соотношения (6) вычисляют функции принадлежности термов-оценок выходных интегральных параметров состояния соответствующих набору значений входных параметров объекта диагностирования.
4. Определяют решение D как такое, для которого функция принадлежности максимальна.

Итоговая оценка осуществляется на основе объединения частичных выводов о состоянии и выполняется с использованием базы знаний D, в которой все правила сформулированы на основе экспертных знаний.

В случае, если в результате оценки в условиях неполной информации о состоянии объекта невозможно достоверно оценить его состояние, то необходимо дополнять или изменять модель оценки состояния объекта, возможно использование дополнительных измерений, использование новых входных параметров.

Литература:

1. Нечеткие алгоритмы оценки технического состояния и прогнозирования остаточного ресурса электрооборудования/Н. В. Костерев, Е. И. Бардик, Р. В. Вожаков, Т. Ю. Курач. // Электротехника и энергетика. 2008. №8. с. 65–70
2. Ротштейн, А. П. Медицинская диагностика на нечеткой логике. — Винница: Континент-ПРИМ, 1996. — 132 с.

Распознавания для вариантных и инвариантных образов

Жетимекова Гаухар Женисовна, старший преподаватель
Карагандинский государственный университет имени Е. А. Букетова (Казахстан)

В статье рассматриваются вопросы распознавания для вариантных и инвариантных образов. А также такие вопросы как, выделение признаков с помощью моментов, приложение инвариантных моментов, логарифмически-полярные преобразования и дискретное преобразование Фурье. И предложен алгоритм для извлечения инвариантных признаков. Статья предназначена для специалистов занимающиеся вопросами распознавания образов.

Ключевые слова: распознавание образов, инвариантный образ, вариантный образ, преобразование, алгоритм, шаг.

Выделение признаков с помощью моментов

Распознавание геометрических образов независимо от позиции, ориентации и размера может быть достигнуто, используя инварианты моментов. Эти моменты единственным образом определяют кусочно-непрерывную функцию $f(x, y)$, которая имеет ненулевые значения только в конечной части плоскости XY. Если $f(x, y)$ — числовое отображение в двумерном пространстве, то моменты порядка $(p+q)$ могут быть

$$M_{pq} = \sum_x \sum_y x^p y^q f(x, y) \text{ для } p, q = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

Центральные моменты могут быть выражены как

$$\mu_{pq} = \sum_x \sum_y (x - x_c)^p (y - y_c)^q f(x, y) \tag{2}$$

где $x_c = M_{10} / M_{00}$, $y_c = M_{01} / M_{00}$

Нормализованные центральные моменты N_{pq} могут быть определены как

$$N_{pq} = \mu_{pq} / (\mu_{00})^\gamma \tag{3}$$

$$\text{Где, } \gamma = (p+q)/2 + 1, \text{ для } p+q = 2, 3, \dots \tag{4}$$

Набор семи моментов может быть получен как инвариант преобразования трансляции, вращению и масштабирования. Эти семь моментов следующие:

$$\phi_1 = N_{20} + N_{02} \tag{5}$$

$$\phi_2 = (N_{20} - N_{02})^2 + 4N_{11}^2 \tag{6}$$

$$\phi_3 = (N_{30} - 3N_{12})^2 + (3N_{21} - N_{03})^2 \tag{7}$$

$$\phi_4 = (N_{30} + N_{12})^2 + (N_{21} + N_{03})^2 \tag{8}$$

$$\begin{aligned} \phi_5 = & (N_{30} - 3N_{12})(N_{30} + N_{12}) [(N_{30} + N_{12})^2 - 3(N_{21} + N_{03})^2] \\ & + (3N_{21} - N_{03})(N_{21} + N_{03}) [3(N_{30} + N_{12})^2 - (N_{21} + N_{03})^2] \end{aligned} \tag{9}$$

$$\phi_6 = (N_{20} - N_{02}) [(N_{30} + N_{12})^2 - (N_{21} + N_{03})^2] + 4N_{11}(N_{30} + N_{12})(N_{21} + N_{03}) \tag{10}$$

$$\begin{aligned} \phi_7 = & (3N_{21} - N_{03})(N_{30} + N_{12}) [(N_{30} + N_{12})^2 - 3(N_{21} + N_{03})^2] \\ & + (3N_{12} - N_{03})(N_{21} + N_{03}) [3(N_{30} + N_{12})^2 - (N_{21} + N_{03})^2] \end{aligned} \tag{11}$$

$$\phi_i = \log(\phi_i) \text{ для } i=1, 2, \dots, 7 \tag{12}$$

Приложение инвариантные моменты

Инвариантные моменты для цифр были рассчитаны, с использованием формул, данных. Моменты имеют малые значения, поэтому были взяты их логарифмические значения семь моментов для каждой цифры описаны в Таблице 1. Эти моменты использовались как входные данные к нейронной сети Кохенена [1]. Моменты первоначальных и преобразованных образов для цифр 2 и 3 даются, например, в таблицах (2, 3). Они показывают, что моменты являются инвариантными при преобразованиях. На рисунке 1 показано распознавание цифр от 2 до 9 при различных преобразованиях.

Преобразования Фурье-Меллина, были введены для регистрации образов, которые имеют нарушения границ вследствие трансляции, вращения и масштабирования. При трансляции образов этот метод использует преобразование Фурье. Затем логарифмически-полярное преобразование применяется для определения спектра величины, вращения и масштабирования с учетом фазы корреляции в логарифмически-полярном пространстве. Это преобразование является причиной вращения и масштабирования, которые есть суть трансляции [2].

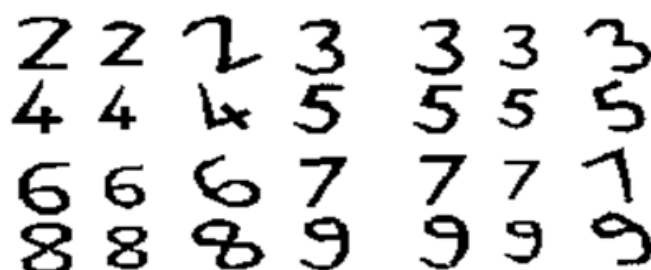


Рис. 1. Первоначальные и преобразованные цифры от 2 до 9

Таблица 1. Моменты первоначальных цифр

Цифры	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7
0	0.289674	1.891244	3.081613	3.707944	7.532423	5.018612	7.135025
1	0.144440	0.316391	2.456137	2.649631	5.204564	2.824600	6.216168
2	0.178210	0.795665	2.528437	2.651690	5.293618	4.912113	5.578113
3	0.135953	0.652886	1.322085	1.968569	3.722268	2.298309	3.816754
4	0.386179	1.634139	1.370766	2.014032	3.710191	2.975653	4.589142
5	0.267451	1.044964	3.369814	2.925594	6.124222	3.448483	6.413185
6	0.260682	1.393926	1.673842	2.024529	4.094603	5.121104	3.971167
7	0.156055	0.691871	0.664061	1.250537	2.356787	1.666528	2.359927
8	0.321487	1.489974	4.330697	4.314062	9.323424	5.154918	8.64582
9	0.2938891	1.2640356	1.7301497	1.9389643	3.941932	2.956681	3.90750

Таблица 2. Моменты образов и вариантов цифры 2

Образ 2	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7
Первоначальный	0.17821	0.795665	2.528437	2.651690	5.293618	4.912113	5.57811
Смещение 0,2	0.17975	0.798129	2.539199	2.633436	5.258346	4.189751	5.61392
Масштабирование 0,8	0.20006	0.859173	2.337220	2.912201	7.030966	3.445200	5.53713
Угол вращения $\pi/6$	0.17396	0.746629	2.275593	2.522349	4.991883	4.351878	5.19973

Таблица 3. Моменты образов и вариантов цифры 3

Образ цифры 3	ϕ_1	ϕ_2	ϕ_3	ϕ_4	ϕ_5	ϕ_6	ϕ_7
Первоначальный	0.135953	0.652886	1.322085	1.9685698	3.7222681	2.2983096	3.816754
Смещение 0.2	0.135953	0.652886	1.322085	1.9685698	3.7222681	2.2983096	3.816754
Масштабирование 0.8	0.159801	0.690702	1.494270	2.1207083	3.9784019	2.4663624	4.270824
Угол вращения $\pi/6$	0.103264	0.529989	1.312760	1.9181933	3.6848698	2.4416071	3.683503

Логарифмически-полярное преобразование

Сделаем обзор логарифмически-полярных координатных преобразований. Рассмотрим полярную систему координат (r, θ) , где r обозначает радиальное расстояние от центра (x_c, y_c) и θ обозначает полярный угол. Любая точка изображения с координатами (x, y) может быть представлена в полярных координатах (r, θ)

$$r = \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2} \quad (13)$$

$$\theta = \arctan \left(\frac{y - y_c}{x - x_c} \right) \quad (14)$$

Применяя полярное координатное преобразование к изображению I , отобразим радиальные строки в декартовой системе координат к горизонтальным строкам в полярном координатном пространстве. Преобразованное изображение обозначим I_p . Преимущество этого нового координатного пространства в том, что простое масштабирование и вращение в этой системе координат могут быть получены изменением значений (r, θ) . С помощью коэффициента масштабирования α в декартовом пространстве изображение $I(x, y)$ отображается на $I(\alpha x, \alpha y)$. Чтобы определить коэффициент масштабирования в логарифмическом пространстве применим преобразование:

ние обозначим I_p . Преимущество этого нового координатного пространства в том, что простое масштабирование и вращение в этой системе координат могут быть получены изменением значений (r, θ) . С помощью коэффициента масштабирования α в декартовом пространстве изображение $I(x, y)$ отображается на $I(\alpha x, \alpha y)$. Чтобы определить коэффициент масштабирования в логарифмическом пространстве применим преобразование:

$$\begin{aligned} (x, y) &\rightarrow (\log x, \log y), (\alpha x, \alpha y) \rightarrow (\log \alpha x, \log \alpha y), \\ (\log \alpha x, \log \alpha y) &\rightarrow (\log x + \log \alpha, \log y + \log \alpha). \end{aligned}$$

Становится очевидно, что в логарифмическом пространстве введение коэффициента масштабирования проявляется как изменение стадии в логарифмическом преобразовании изображения. Поэтому, вместо того, чтобы отображать изображение в координатное пространство (r, θ) , лучше отобразить его в координатное пространство $(\log r, \theta)$, используя логарифмически-полярное преобразование. Переводя начало координат оттранслированного изображения к центру в логарифмически-полярном пространстве, получают инвариантный коэффициент масштабирования в этом пространстве. Поэтому логарифмически-полярное преобразование — это инвариантное вращение и коэффициенты масштабирования первоначального изображения [3].

Дискретное преобразование Фурье

Дискретное преобразование Фурье для оттранслированного изображения эквивалентно дискретному преобразованию Фурье на первоначальном изображении. Поэтому можно применить дискретное преобразование Фурье на логарифмически-полярном изображении, преобразованном уравнением (15) и получить спектр его величин с помощью уравнения (16), где $R(X)$ — вещественная часть, и $I(X)$ — мнимая часть спектра Fourier.

$$X(k_1, k_2) = \sum_{n_1=0}^{N_1-1} \sum_{n_2=0}^{N_2-1} x(n_1, n_2) \exp(-j \frac{2\pi}{N_1} n_1 k_1 - j \frac{2\pi}{N_2} n_2 k_2) \quad (15)$$

для $0 \leq k_1 \leq N_1 - 1, 0 \leq k_2 \leq N_2 - 1$

$$|X(k_1, k_2)| = \sqrt{R^2(X) + I^2(X)} \quad (16)$$

Теперь, мы можем получить инвариантные особенности изображения при преобразованиях Фурье-Меллина. Для этого, мы вычислим моменты спектра величин (дискретное преобразование Фурье), которые и будут особенностями инвариантов введения нейронной сети, можно также вычислить собственные значения и собственные векторы спектра Фурье (дискретное преобразование Фурье).

Преобразование Фурье-Меллина используется для идентификации образов которые подвергались некоторым преобразованием, таким как смещение, вращения, растяжение и сжатие.

Преобразование Фурье применяется для восстановления образов при сдвигах. Затем применяется логополярное преобразования для извлечения инвариантных признаков.

Алгоритм для извлечения инвариантных признаков

Шаг 1. Оцифровывание исходного образа.

Шаг 2. Трансформация образа такое как смещение, вращение, растяжение, сжатие.

Шаг 3. Применение преобразования Фурье-Меллина к каждому образу заключается в следующем

а) преобразование декартовых координат в полярные координаты используя лог-полярное преобразование для матрицы с размерностью (128'128) или (64'64) или (32'32).

б) применение быстрого преобразования Фурье для образов полярных координатах.

с) Вычисление абсолютного значения FFT которое выражает множество инвариантных признаков исходного образа.

д) Применение PCA метода для сокращения размерности вектора [FFT].

Шаг 4. Использование множества базисных признаков найденных на шаге 3 (д) в качестве входных данных для гибридной нейросети. В качестве инвариантного признаков берутся собственные значения в порядке возрастания.

Шаг 5. Применение гибридной сети к найденному на шаге и входному вектору [FFT] размерности 64 для сокращения размерности входного вектора и окончательное распознавания уже с помощью карты Кохенена.

Заключение

Для решения исходной задачи производилось сравнение двух методов: метода геометрических моментов и метода преобразования Фурье-Меллина.

В результате сравнения определено что метод преобразования Фурье-Меллина предпочтительно для извлечения инвариантных признаков чем метод геометрических моментов, что дает и лучше качество распознавания. В свою очередь для метода преобразования Фурье-Меллина для сокращения размерности входного вектора удалось применить метод покомпонентного анализа (РСА) и было определено что 8 наибольших собственных значений дают лучшие результаты распознавания чем вектор |FFT| размерности 64.

Литература:

1. Фролов, А. А., Муравьев И. П. Нейронные модели ассоциативной памяти. — М.: Наука, 1987. — 160 ст.
2. Фу, К. Структурные методы в распознавании образов. — М.: Мир, 1977. — 320 ст.
3. Фукунга, К. Введение в статистическую теорию распознавания образов. — М.: Наука, 1982. — 367 ст.

Machine translation error analysis

Краснова Татьяна Ивановна, старший преподаватель;
Ванюшин Иван Сергеевич, студент

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Krasnova T. I.

National Research Tomsk Polytechnic University, instructor

Vanushin I. S.

National Research Tomsk Polytechnic University, student

Introduction

In the age of globalization when the world tends to erase the boundaries for global benefit, understanding of foreign languages gives new perspectives for a world citizen. People of different cultures get closer and distance between countries is swept away with the rise of new communication technologies. The only thing that can disturb this convergence of cultures is language. In multilingual society the knowledge of one or two foreign languages is not enough now. Under such conditions machine translation (MT) goes through a rebirth. Information technologies and the Internet made a tremendous impact on translation. We can call it a digital revolution in translation. Alongside with reliable professional applications there is a rapid proliferation of automated online translation services and translation applications for smartphones.

MT is often criticized for poor quality output that demands manual post-editing to bring it up to high-quality standard. This low-quality translation can be used only to get indication of the content of the original text. Sometimes this 'indicative translation' is enough, especially when you don't care about the details and need only the main idea of the text, for instance it is good enough for the translation of web pages. But most often this problem is seen as MT weakness.

Historical background

In our article we will define MT as a process of text translation from one natural language to another, using software.

It can't be seen as a simple substitution of words as it is a very complicated process which main purpose is the realization of high-quality translation of the text in natural language to its equivalent in the translated language.

The concept of MT is quite old. It begins with the ideas of G.W. Leibniz about the possibility of the mechanical translation through philosophically-mathematical interim language (1646–1716), C. Babbage about the possibility of implementation of translation done by machine (1836–1848) and with the invention of Russian scientist P.P. Smirnov-Troyansky, who offered in 1933 a mechanical translator which automatically selected word equivalents for the units of the input language. On these ideas the theory of machine translation was based. The founder of this theory was W. Weaver. In 1947 for the first time he proved theoretically the fundamental possibility of MT systems creation. The foundation of the theory was the fact that any natural language is a code system and the automated translation process may be limited to the decoding process.

Until the late 1980s, MT was largely dominated by rule-based systems where grammar and syntax rules were combined with cross-language dictionaries. In the 1990s, the shift was to experimenting with sets of parallel texts. In statistical based MT, algorithms analyze large collections of previous translations or parallel corpora to estimate the statistical probabilities of words or phrases in one language ending up in another. A model is then constructed on the basis of these probabilities and used to evaluate new text. By implication, these systems perform best on the types of texts on which they have been trained [1].

Yandex MT approach

Nowadays there are a lot of machine translation systems that can be classified on different grounds. The most popular applications are Google Translate Toolkit, Babylon Translator, PROMPT, Yandex, Systran and so on. They all have different algorithms; let's look, for example, how Yandex translation system works.

The main distinctive feature of this system is that it is statistical. It means that its translation methodology is based not on language rules (the system even doesn't know them) but on statistics. To learn a language, the system compares hundreds of thousands of parallel texts which contain the same information, but in different languages. It may take, for example, large texts from multilingual versions of organizations' websites. Initially, the system finds parallel texts at documents addresses, often these addresses differ only by notes, for example, «en» or «us» for the English version and «ru» for the Russian one. For every studied text the system builds a list of unique signs. These could be rarely used words, numbers or special symbols found in the text in a certain sequence. When the system gains a sufficient number of signs from texts, it begins to look for parallel texts comparing with their help the characteristics of the new texts and already studied. To meet current translation quality standards, the system should learn the hundreds of millions of phrases in different languages. It requires very large resources: a lot of space on HDDs, lots of RAM and so on. That is why the existing machine translation systems are in such limited number.

In Yandex machine translation system there are three main parts: the translation model, language model, and a decoder. The translation model is a table, in which all words and phrases the system knows in one language lists all possible translations into another language and contains the possibilities of these transfers (for each pair of languages there is their own table). This model is created in three steps: firstly we select parallel documents, then in them — the pairs of sentences, and then a pair of words or phrases [2]. After that the decoder performs a translation. For each sentence of the original text, it finds all transfer options, combining together phrases from the translation models, and sorts them in the descending order of probability. The decoder estimates all variants of the output combinations using the language model. As a result, the decoder selects a sentence with the best combination of probability (in terms of translation model) and frequency of use (in terms of language model).

Current problems in MT

There is no doubt that MT is still imperfect and there are a lot of problems that arise during the translation process. All human translators know translation is not simply a matter of finding the target words that correspond to the words in the source text, and then getting the target grammar right. In

fact it involves selecting the correct sense of each individual word, and recognizing the relationship between the words, as expressed by the syntax of the source text [3]. This task is quite difficult for a computer programme.

We will have a closer look at these problems and try to consider them by translating the same phrase in such MT systems as Google Translate, Yandex. Translate and PROMPT.

1. Lexical problems

Word usage of translators often conflicts with the database of words known by translator.

Source:

Scuba, wetsuit, swimfin are necessary for divers.

Google Translate:

Scuba, wetsuit, fins are necessary for divers.

Yandex. Translate:

Scuba, wetsuit, fins required for divers.

PROMT:

The aqualung, diving suit, flippers are necessary for divers.

2. Word conjunction and polysemy

Multi-meaning words are real problem for machine translation for one simple reason: sometimes it is really difficult to choose one or another. People usually use the context of the phrase, but meaning of phrase, which is cut off from text or speech, becomes undefined for translator.

Source:

My bow is more beautiful than your bow!

Google Translate:

My beautiful bow your bow!

Yandex. Translate:

My bow your beautiful bow!

PROMT:

My onions are more beautiful than your onions!

3. Syntactic problems

Source:

Don't be angry with him.

Google Translate:

Do not hold a grudge against him.

Yandex. Translate:

Don't be angry at him.

PROMT:

Don't harbor malice against it.

4. Problems at the level of production and transmission

Source:

Listen, if stars are lit, it means — there is someone who needs it.

Google Translate:

Listen, because if the stars are lit, it means someone needs?

Yandex. Translate:

Listen, if the stars are lit, it means that someone need?

PROMT:

Listen, after all if stars light, it means to somebody it is necessary?

These examples demonstrate that MT systems can't translate with a hundred per cent accuracy. Thus the problem of accuracy remains central for MT systems developers.

Conclusion

Machine translation has a long history but is still relatively immature technology. For the past decade researchers and developers have been trying to determine the efficacy of ex-

isting MT systems and to find solutions for optimizing these MT systems. The progress in the field of MT depends on systematic evaluation and quality control. Every new system works better than the previous one. There are still certain limitations in applications but MT accuracy increases every year.

References:

1. Wilks, Y. (2009). *Machine Translation: its Scope and Limits*. New York: Springer.
2. Malmkjaer, K., Windle, K. (2011). *The Oxford Handbook of Translation Study*. New York: Oxford University Press.
3. Cronin, M. (2013). *Translation in the Digital Age*. New York: Routledge.

Increasing contact center efficiency through automatic dialers

Максимова Акмарал Торегалиевна, магистрант

Международный университет информационных технологии (Казахстан)

Maksutova Akmaral, master

International Information Technologies University (Kazakhstan, Almaty)

The article proposes a new approach (algorithm) of quickly and efficiently calling models of customers in organizations which using CRM system for customer service through telephone channels.

The large organizations as Banks, consulting companies use CRM systems for customer service through the telephone channels. And it's complicated to make the communication effectively without lost, technical breaks, and thus save the time.

There are several kind of drivers and systems offer the solution to make communication automatically, and one of the best decisions is offered by CISCO, as called CISCO Dialer or Cisco Unified Contact Center Enterprise. But having the automatic tool for call is not enough to organize the effective calling when the phone number for calling is not available, when the client has several phone numbers, when the call is broken, or there is need to exclude the phone in a real time and etc.

Automatic dialers increase contact center efficiency because they eliminate the possibility of reaching a wrong number, save time, and make contact center agents more productive. By automatically dialing and screening for busy signals, no answer, and answering machines, dialers ensure that agents do not waste time on non-value-added mechanical and routine tasks. Only when the dialer reaches a live contact will the solution transfer the call to the next available agent.

The Cisco Outbound Option application provides outbound dialing functionality along with the existing inbound capabilities of Cisco Unified Contact Center Enterprise. This application enables the contact center to dial customer contacts and direct contacted customers to agents or IVRs. With the Cisco Outbound Option, you can configure a contact center for automated outbound activities.

Outbound Option features include:

- Unified CCE Compatible Dialer
- Campaign Management
- Unified Contact Center Software Management of Skill

Groups

- Outbound Option Dialing Modes
- Outbound Option activity reports
- Callbacks
- Call Progress Analysis (CPA)
- Transfer to IVR
- Sequential Dialing
- Cisco IP Contact Center Agent Re-skilling
- Abandoned and Retry Call Settings
- Campaign Prefix Digits for Dialed Numbers
- Outbound Option Support on Cisco Unified Contact

Center Hosted

- Outbound ECC Variables Support in Siebel 7.5.3 and

Later

Outbound Option supports the following dialing modes:

- Preview
- Direct Preview
- Progressive
- Predictive

Depending on the Outbound Option campaign settings, a callback can be scheduled as a *personal callback* or a *regular callback*.

The transfer to IVR feature provides Outbound Option with another outbound mode. This mode causes the Dialer to transfer every customer call associated with a specific skill group to a service control-based IVR instead of an agent. This feature allows a contact center to run unassisted outbound campaigns using pre-recorded messages in the Cisco Unified IP-IVR and Cisco Unified Customer Voice Portal products.

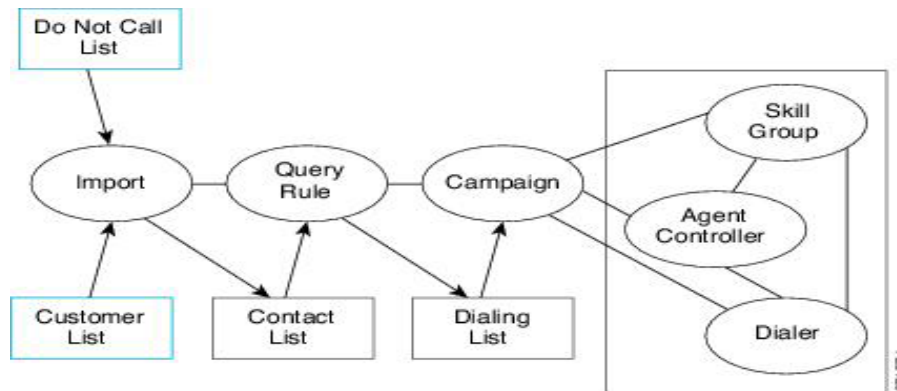


Fig. 1

The following figure shows the component relationships within Outbound Option

Query Rules. The query rule determines which customer contacts to use from the import for a campaign. You can associate multiple query rules with a campaign; therefore, you can use them to segment a campaign by query rule for prioritization or other logical groupings. For example, if your campaign requires dialing customers between the hours of 9:00AM and 11:00AM, you could set up a query rule to only dial during those times, then configure the campaign to switch to another query rule after that time when the sequence has ended.

Campaigns. A campaign is made up of one or more query rule-generated dialing lists and one or more campaign skill groups. Outbound Option reads in contacts from the dialing list associated with the active query rule for the campaign, and directs Dialers to place calls to customers. The Dialer then directs contacted customers to agents or IVRs in the campaign skill group for applicable customer treatment. The Dialer adjusts the number of customers to dial per available agent (or IVR port for a transfer to IVR campaign). As in Progressive mode, when multiple customers answer the calls placed for a single agent, secondary answers can be transferred to another associated agent in the campaign, or sent to the configured IVR for abandon treatment and possible queuing if no agents are available. If no agents or IVR is available, the call will be dropped without treatment. A Predictive Dialer is designed to increase agent utilization in a call center. To increase the chances of reaching a customer, a Predictive Dialer dials several phone lines per available agent. The goal is to dial enough lines to keep the agents busy while not exceeding the configured maximum abandoned call rate. An abandoned call occurs when a customer answers the phone, but no agent is available to talk to them. In some cases, the abandoned call rate is limited by government regulations (typically, less than 3% for telemarketing calls). In Predictive and Progressive mode, agents that are reserved remain reserved until there is a successful live call. They are not immediately released if a live call is not available. On campaign completion (when the dialing list for the campaign runs out of records), agents who remain reserved are released.

Caller ID Masking by Campaign. Outbound Option allows you to configure up to 15 prefix digits for dialed numbers in a campaign. If you configure a prefix, it will be inserted before the Dial prefix for all numbers dialed in a campaign. For example, all customers dialed from Campaign A will see a caller ID of «1-800-333-4444,» while all customers dialed from Campaign B will see a caller ID of «1-800-555-1212.» The prefix digits are always prepended to the beginning of the number, so that they can easily be stripped using translation patterns.

Callbacks. When the system contacts a customer and transfers the call to an agent, the customer has the option to request being called back at a later date and time. The agent enters the date and time the customer would like to be called into the agent application, and the call is scheduled for callback. If an agent is skilled for a predictive campaign and schedules a callback for that campaign, the callback for that campaign will be handled in Predictive mode as well (callbacks are handled in the same mode as the campaign type). Depending on the Outbound Option campaign settings, a callback can be scheduled as a regular callback or a personal callback.

- Regular callbacks can be handled by any agent assigned to the campaign, where the customer is called back using the configured campaign mode.

- Personal callbacks allow the customer to receive a callback from the agent they spoke to when they were first contacted. The customer is called back using a similar mode to the Preview dialing mode. Callbacks on personal callbacks are handled in the associated campaign mode.

Campaign Skill Groups. A campaign skill group describes the resource pool for a campaign and provides the necessary information for managing the campaign. For larger enterprise deployments with multiple contact center sites, skill groups are associated with a specific contact center site, which might have different hours of operation and different IVR equipment. Dialing Mode is a skill group attribute, so that contact center skill groups can be opened and closed at different times for shared campaigns using Unified CCE administrative scripts.

Having these advantages which dialer offers, even it couldn't be enough to organize the effective dialing.

The purpose of the research and development is to ensure that all campaigns called intensive regardless of several factors. For example, you can take the weight of a joint campaign + type of ring up the phone, because mobile number is a critical or dependence on ringed up phones to remaining of outgoing calls, i. e. in campaigns, where a large figure, it is necessary to call intensively.

It is also important not to postpone the all contact with the client, but the client's specific phone number. But the logic of exclusion of contact should be monitored by chosen CRM system, because otherwise in the case of dial-up phone number, all contact with the client will be excluded with the scheme above, and on the side of the application may be the result of two call results that lock manager and they require a recall:

- 1) Wrong number
- 2) Unreached

Necessary to exclude the contact with the client completely, only if the successful status with the client's contact is reached or payment delayed or informed about the payment.

Finally having all of these advantages of dialer, the following algorithm for effectively dialing was generated and realized:

- 1) External analytical system generates outbound dialing campaigns
- 2) Gateway loads the data from External analytical system to chosen CRM system tables
- 3) Chosen CRM system enriches data from External analytical system — adds the customer's phone number, PIN, etc. and unload to Outbound dialer
- 4) The analytics of calls made by the contact center and error codes from a CDR file of telephony are loaded every day to chosen CRM system from the external scheme in database, where the number does not exist. Once upon the receipt of the response code that number does not exist, there is need to exclude the telephone number from outgoing calls to 7 working days.
- 5) Chosen CRM system forms the view for bus system by the job. Another job works on the bus system side that once the data appear in the chosen CRM system, it starts data transmission in Outbound by the calling of stored procedure for each transmission line. Bus system works in multithreaded mode for 5 streams. Upon receipt of a successful report from Outbound, bus system affix status sent to chosen CRM system
- 6) When importing data to the contact number of the client the stored procedure on the dialer, adds a prefix to the beginning of the number (5 different prefixes) and duplicates one phone number. It's for ensure that when you retry the call he got on different gateways and determined on the client differently
- 7) Keep a list of prefixes in the Outbound configuration, and dialer depending on the number of attempts to call on the phone, substitutes a prefix to the phone itself. Thus, while maintaining the results on a call or contact with a cus-

tomers account for one number current problems in recognizing numbers should disappear

8) Chosen CRM system according to the priority of the campaign for all campaigns with first priority forms the unload, complements the list of phone numbers (limit of 10 phones), uploads data directly into the database by adding the dialer through a stored procedure on the side of the dialer through gateway.

9) Only the contact with the specified phone number + 3 different prefixes are formed

Code	The prefix	Description
CALL_PRI	07	PRI numbers
CALL_AON	09	AON numbers
CALL_HIDDEN	08	Hidden numbers

10) The dialer is set in a mode to start automatically at a specified time. Telephoning mobile numbers begins at 9—00. The job which unloads codes results of outgoing calls for each phone number from the dialer in chosen CRM system works every 10 min (N min is setting).

11) Chosen CRM system generates a new list of telephone calls on the following priority contact numbers of customers, with the exception of those customers for which the result is payment delayed, informed about the payment. When forming a list of telephone calls the start and end time of outgoing calls on phone type, time zone is taken into account

12) If the amount of tasks that are on ring up + new list for telephone calls is less than 10% of the total number of tasks in the roll call for this campaign, the job automatically starts work on the campaign, with the following priority. It's provided by Query Rule mechanism

13) In case of connecting the agent with the client (successful status in dialer) and the conversation is not completed due to technical reasons (answering machine, call disruption), i. e., unsuccessful status in chosen CRM system — this status is fixed in chosen CRM system, and the another phone with next priority goes on calling

14) In the case of payment by the client and the job didn't work in time, it will be excluded from the dialer.

15) In the case when a phone number exists in the blacklist, it checks for jobs on telephone calls and if there is a default, then the dialer excludes phone number from outgoing calls

16) In case of connecting the agent with the client (successful status in dialer) and the client asks to call back, the Callback is appointed for a specified time

17) In the case of that all customer numbers isn't reached technically, then Chosen CRM system affix status UNREACHED on the client.

So the following the algorithm and technical proposing from CISCO above will let to eliminate the possibility of reaching a wrong number, save time, and make contact center agents more productive, by automatically dialing and screening for busy signals, no answer, and answering machines, dialers ensure that agents do not waste time on non-value-added mechanical and routine tasks in the organization which CRM systems for customer service through the telephone channels.

Роль проблемно-ориентированных информационных систем для поддержки принятия решения в современной эхокардиографической диагностике

Розыходжаева Дилдора Абборовна, магистрант
Ташкентский университет информационных технологий (Узбекистан)

Розыходжаева Гультнора Ахмедовна, доктор медицинских наук, доцент, заведующая отделом
Центральная клиническая больница №1 медико-санитарного объединения (г. Ташкент, Узбекистан)

В статье речь идет о возможности повышения эффективности эхокардиографической диагностики путем разработки и внедрения проблемно-ориентированной информационной системы для поддержки принятия решения и прогнозирования. Достичь этого можно применением теории систем (системный подход) и теории четких и нечетких множеств; теории графов, выбора и принятия решений; теории ситуационного управления и программирования; Вейвлет анализа; OLAP-анализа. Кроме того, учет мнений высококвалифицированных экспертов-кардиологов для формирования перечня обязательных параметров, необходимых для разных уровней трансторакальной эхокардиографии, а также соблюдение действующих современных рекомендаций позволит снижению некорректно принятых решений.

Ключевые слова: информационные системы, поддержка принятия решения и прогнозирования, эхокардиография.

Стремительный рост объема информации, необходимой врачам в их практической деятельности при диагностике и лечении заболеваний характерен для последних десятилетий [4, 5, 6, 7]. При этом практическая медицина все еще остается трудно формализуемой областью человеческой деятельности, в которой специалисты при принятии решений зачастую исходят из предыдущего профессионального опыта и собственной интуиции, а не из анализа объективных данных [3]. В такой ситуации трудно избежать врачебных ошибок, социальное и экономическое значение которых чрезвычайно высоко. Возникает необходимость увеличения числа учитываемых и анализируемых врачом взаимозависимых показателей деятельности организма, что еще больше усложняет задачу выбора адекватных, взаимодействующих между собой, лечебных воздействий. Поэтому как никогда проблема снижения некорректно принятых решений в медицине, известная как врачебные ошибки, актуальна во всем мире. На её разрешение ориентированы методы доказательной медицины с целью обоснования методики и стандартов лечения, применение контрольно-измерительных устройств и средств компьютерной диагностики [1, 3, 5, 6].

Растущие объемы информации, появление новейших диагностических и лечебных технологий требуют принципиально иных подходов к обработке и интерпретации медицинских данных, возможности накопления, хранения и использования опыта квалифицированных специалистов. Для научных исследований в медицине также уже совершенно недостаточно использовать стандартные наборы статистических методов для обработки материала. Требуются универсальные инструменты с возможностью гибкой постановки задач, не нуждающиеся в длительном времени для разработки. Всем вышеперечисленным требованиям могут отвечать системы, способные самонастраиваться на решение задач.

Современная кардиология немыслима без использования ультразвукового исследования сердца — эхокардиографии. Эхокардиография предоставляет подробную информацию о структуре и функции сердца и магистральных сосудов неинвазивно и при относительно низких затратах. Поэтому она широко используется в качестве диагностического инструмента при оценке пациентов с различными заболеваниями сердца [9, 12]. Растущий спрос на контроль качества и совершенствования требует стандартизированного и структурированного подхода к оценке эхокардиографии. Стандартизированная документация в эхокардиографии необходима для обеспечения сопоставимости данных и реализации на базе программного обеспечения документации [9, 11, 12].

Выделение объема информации, необходимой в каждой конкретной ситуации, и стандартизация информативных параметров чрезвычайно важны в русле современных требований к стандартизации в системе здравоохранения в целом, и в эхокардиографии, в частности [9, 10, 11, 12]. Важна разработка диагностических методов при наличии малозатратных и быстро доступных данных, полезную дополнительную диагностическую информацию «выжать» из которых только усилием естественного интеллекта врача невозможно. А это вполне возможно с использованием методов искусственного интеллекта искусственных нейросетевых моделей и при наличии доступного и недорогого компьютера [4, 8].

Задача постановки эхокардиографической диагностики осложняется многими факторами (недостатком соответствующих специалистов за пределами областных и районных центров; постоянное обновление рекомендаций и методов диагностики; огромное многообразие параметров диагностики, из которых бывает сложно выбрать наиболее информативные; субъективность отдельно взятого врача, принимающего решение) [9, 11, 12]. Дикту-

ется необходимость создания автоматизированных систем поддержки принятия решений при эхокардиографической диагностике и их применения в повседневной работе врача, выполняющего эхокардиографические исследования в медицинском учреждении любого уровня. Это позволит значительно повысить производительность труда, сократить время для анализа результатов исследований и подготовки врачебного заключения, легко и просто вести учет выполненной работы и готовить отчетную документацию [2, 4, 8].

Несмотря на многие достоинства программного обеспечения, поставляемого зарубежными производителями ультразвуковой диагностической техники, существует ряд проблем, затрудняющих работу по анализу результатов, формированию врачебных заключений и отчетов о проведенных исследованиях при использовании этих программ. Зарубежные аналоги подобных программных продуктов отличаются дороговизной и зачастую используются только при работе с определенной моделью прибора конкретного производителя. Зачастую трудно создать единую базу данных по всем эхокардиографическим исследованиям, выполненным на разных аппаратах. Кроме того, отсутствует поддержка узбекского языка, а иногда и русского языка.

В своей разработке нами поставлена цель — повысить эффективность эхокардиографической диагностики путем разработки и внедрения проблемно-ориентированной информационной системы для поддержки принятия решения и прогнозирования. Для достижения этой цели нам необходимо решить следующие задачи:

— Провести анализ особенностей функционирования компьютерных систем автоматизации лечебно-диагностического процесса, оценить возможность применения информационной системы для поддержки принятия решения и прогнозирования.

— Провести структурно-параметрический анализ и идентификацию набора стандартизированных параметров при различных уровнях эхокардиографической диагностики при сердечно-сосудистых заболеваниях.

— Разработать алгоритмы и модели построения экспертной системы для медицинской диагностики, прогнозирования и принятия решений

— Оценить эффективность использования разработанного комплекса моделей и провести апробацию результатов исследования в условиях медицинского учреждения.

— Теоретические и экспериментальные исследования будут базироваться на использовании следующих методов и теорий:

— Теория систем (системный подход) и теория четких и нечетких множеств;

— Теория графов, выбора и принятия решений;

— Теория ситуационного управления и программирования;

— Вельвет анализ;

— OLAP-анализ.

Учитывая, что каждый из рассматриваемых результатов обследования пациента по отношению к задаче диагностики носит нечеткий и неполный характер, для синтеза соответствующих решающих правил целесообразно использовать также теорию нечеткой логики принятия решений. Перечень обязательных параметров, необходимых для разных уровней трансоракальной эхокардиографии формируется с учетом мнений высококвалифицированных экспертов-кардиологов [1, 8, 10, 11].

При разработке программного продукта изучается структура процесса постановки диагноза и связи между результатами эхокардиографии, создающие основу для ранжирования альтернативных врачебных решений по их относительной важности на каждом уровне установления диагноза. В последующем будет применен метод интеллектуальной поддержки, позволяющий воспринимать, структурировать и накапливать знания, обеспечивая процесс поддержки принятия врачебного решения.

Таким образом, практическая значимость нашей работы будет заключаться в разработке специального программного обеспечения проблемно-ориентированной информационной системы диагностики и прогнозирования, охватывающей все этапы диагностического процесса для принятия врачебного решения в современной эхокардиографии [11]. Важно отметить, что программы могут работать на обычных персональных компьютерах, компактны, и не потребуют большого количества оперативной и постоянной памяти ЭВМ.

Литература:

1. Бессонова, Т.В. «Методы интеллектуальной поддержки принятия решений в задачах диагностики и лечения хронической сердечной недостаточности». — Воронеж: 2008. — 135 с.
2. Бондарева, Е. И. Разработка и обоснование модели системы информационного обеспечения региональных клиник больниц: автореф. дис... канд. мед. наук. — Новосибирск. — 2006. — 24 с.
3. Гулиева, И. Ф., Рюмина Е. В., Гулиев Я.И. Вопросы эффективности информационных технологий в медицине // Врач и информационные технологии. — 2011. — №5. — с. 6–18.
4. Драпкина, О. М. Информационные технологии в кардиологии. перспективы развития // Российский кардиологический журнал. — 2013. — №4. — с. 23–27.
5. Дюк, В.А., Эмануэль В.Л. Информационные технологии в медико-биологических исследованиях. — СПб.: Питер, 2003. — 528 с.
6. Ковалёв, В.П. Использование информационных технологий в совершенствовании медицинского обслуживания населения: дис...канд. мед. наук: М.: ГОУВПО «Московская медицинская академия». 2012. — 203 с.

7. Никитин, В. М., Ломакин В. В., Анохин Д. А. и соавт. Информационная система поддержки принятия решений слабоструктурированных задач в кардиологии // Научные ведомости Белгородского государственного университета. — 2010. — Т. 19, № 16 — с. 112–119.
8. Учайкин, В. Ф. Главные слагаемые успешного лечения пациента — квалификация врача, его способность овладевать медицинскими и информационными технологиями, ориентироваться в широкой линейке лекарственных средств. // Эффективная фармакотерапия. — 2013. — № 13. — с. 4–7.
9. Cerqueira, M.D., Weissman N.J., Dilsizian V. et al. Standardized myocardial segmentation and nomenclature for tomographic imaging of the heart: a statement for healthcare professionals from the Cardiac Imaging Committee of the Council on Clinical Cardiology of the American Heart Association. //Circulation. — 2002.-V105. N4. — 539–542
10. Evangelista, A., Flachskampf F., Lancellotti P. et al. European Association of Echocardiography recommendations for standardization of performance, digital storage and reporting of echocardiographic studies.// Eur J Echocardiogr. — 2008. — N 9. — P. 438–448
11. Gardin, J., Adams D., Douglas P. et al. Recommendations for a standardized report for adult transthoracic echocardiography: a report from the American Society of Echocardiography's nomenclature and standards committee and task force for a standardized echocardiography report. //J Am Soc Echocardiogr. — 2002. — N15. — P. 275–290
12. Popescu, B. A., Andrade M.J., Badano L.P. et al. European Association of Echocardiography recommendations for training, competence, and quality improvement in echocardiography.// Eur J Echocardiogr.—2009.-N10. — P. 893–905.

Эффективное применение программы 3D Max в учебном процессе

Сланбекова Асылзат Ермановна, старший преподаватель, магистр технических наук;

Каменова Шынар Каменовна, преподаватель;

Хасенова Айгерим Асхатовна, преподаватель

Карагандинский государственный университет им. Е. А. Букетова (Казахстан)

В эре компьютеризации, когда в сфере образования необходимо использовать информационные компьютерные технологии, возникает проблема поиска нужных учебных материалов и программ, которые создают эти материалы. Эту проблему можно решить с помощью программы 3D Max. Программа 3D Max — лидер рынка программного обеспечения для трехмерного моделирования, анимации и визуализации. Открытая архитектура 3D Max позволяет аниматорам воспользоваться преимуществами использования более чем ста подключаемых приложений, чтобы быстро и легко добавлять впечатляющие эффекты. Более того, с помощью 3D Max они могут даже создавать свои собственные приложения-модули, чтобы придавать оригинальный вид своим творениям.

Программа 3D Max дает возможность создавать трехмерные объекты и оживлять их, обрабатывая объекты и используя различные команды можно изменить форму этих объектов.

В программе 3D Max есть только один предел — это наше воображение. В трехмерной графике существует много возможностей. Эту программу используют в различных сферах, особенно художники-дизайнеры и web-мастера. Web-мастера используют программу для создания изображений и баннеров. Аналогично можно создавать другие разные формы: проекты больших зданий, фонтанов и т. д.

Познакомившись с программой 3D Max и теорией моделирования, можно научиться создавать стандартные и расширенные примитивы, также устанавливать на них различные модификаторы. Использование модификаторов к общим объектам это один из самых простых методов моделирования. Чтобы смоделировать сложные объекты можно применить метод лофтинг. Метод лофтинг создается через два сплайна, первый — контур поперечного отрезка объекта, второй — путь объекта. Некоторые программисты не поддерживают метод лофтинг, потому что при установлении материала и текстуры на объект есть вероятность, что они установятся с дефектом.

Вместе с этим на объекты можно применить булевы операции. В этом виде моделирования участвуют два или еще больше объектов. В конце, они соответственно выбранному режиму объединяются в один объект, и остаются только стороны, которые пересекаются, или один объект срезается с другого объекта. На сегодняшний день самый распространенный метод моделирование объектов выполняются основными методами-командами сетевого и полигонального моделирования, которое осуществляется через изменения сетей и полигоны объекта.

Для работы с этими видами моделирования на объекты устанавливаются соответствующие модификаторы Editable Mesh (обрабатываемая сеть) или Editable Poly (обрабатываемый полигон), изменяя элементы нижнего

сложения объекта — вершины, боковые стороны, ребра, полигоны можно изменить поверхность объекта. С помощью этого моделирования из примитива *Box* (параллелепипед) можно смоделировать диван, самолет и даже облик человека. В *3D Max* не рассматривается моделирование через *NURBS*-линии и Безье, потому что эти методы в этой программе плохо работают. Вообще, при создании объекта используются следующие методы: создание стандартных и расширенных примитивов, изменение их поверхности и внешнего вида, применение модификаторов, метод *лофтинг*, создание трехмерных объектов с помощью сплайн-линий, использование метода булевых операций, сетевое и полигональное моделирование.

В программе *3D Max* можно освоить методы работы с объектами. Эти методы — отметить объект, выбор по имени, перемещение объектов, вращение, изменение масштаба, настройка свойств, изменить точку опоры, показывать или не показывать на сцене, заморозка или разморозка, показ невидимых объектов, иерархическая связь многих объектов, сгруппировать объекты, открыть и закрыть группу, сделать копию образца, ссылку объекта, при помощи другого объекта выравнивание места данного объекта, создать массив объектов, загрузить объект с другой сцены на текущую сцену, экспортировать объекты.

Еще один большой этап моделирования — процесс назначения материала на объект. Если посмотреть на вещи, которые нас окружают, то мы видим, что они сделаны из различных материалов: из дерева, железа, цветного металла, керамики, стекла, зеркала, воды, травы, коралла, резинки и т. д. Моделирование этих материалов требует знания и много времени. Показав к какому материалу относится объект, тип рендеринга, степень излучения света, свойства преломления и отражения вещества, изменив прозрачность, можно добиться более реалистичной модели объекта.

Установка материала на объекты предназначено для того, чтобы создаваемые объекты были схожи с окружающими нас. Установка материала и программы изменения реализуется через *Material Editor*. Основные настройки в нем: тип рендеринга, цвет, степень и цвет отражения, степень глянцевого отражения, цвет и размер свечения, настройки уровня прозрачности. Еще можно работать каналами, отвечающими за свойства предмета и процессами установления растровых изображений. Преломление света на теле, прозрачность, самоизлучение — они все являются свойствами предмета.

После моделирования объекта и установления на него материала следующий этап моделирования — это моделирование сцены. При моделировании сцены использование камеры и источников света требуют особого мастерства. Потому что, если мы камерой выберем неправильный ракурс, сцена будет выглядеть неприятной даже если она очень красочна. Правильно установленные источники света, тоже влияют на реалистичность сцены. В программе имеется 2 источника камеры — направленный и ненаправленный. Каждый из них имеет свои преимущества и недостатки. С одной стороны, если на-

правленная камера все время наведена на нацеленный объект — это ее хорошее свойство, с другой стороны если нужно изменить положение камеры и нацеленный объект будет меняться, то использование направленной камеры неэффективно. Работать с ненаправленной камерой легче. В программе имеются шесть основных источников света. Среди них более используемый свет это — свет распространяющийся на все стороны (*Omní*). Основное свойство этого источника работа с интенсивностью света и созданием тени, поэтому сцена будет выглядеть красивой.

Работа с анимацией в программе *3D Max* тоже требует мастерства. Здесь можно анимировать любой объект: примитивный объект, источник света, источник камеры или же дополнительный объект. Можно анимировать не только движение и поворот, но и свойства объекта, например, длину, ширину, уровень видимости на сцене, а после установления модификатора их параметры, даже материальные свойства объектов, например изменение цвета и уровня диффузного излучения света, отражения, шероховатости. Такая огромная возможность, во первых требует от программиста знаний, во вторых, это означает, что сама программа всегда будет иметь большой спрос.

При создании анимации нужно рассматривать принципы работы частотами кадров и ключами. Если частота 30 кадров в секунду, то это дает качественную картину, но требует много ресурсов и анимационные файлы займут много памяти. При анимировании, если используем 25 кадровых частот, то можно сэкономить компьютерные ресурсы и это удобно в расчете времени анимации. Потому что 25 кадров в 1 секунду, и можно легко прогнозировать анимацию в каждую проходящую секунду и предполагать порядок времени.

Последний этап работы с программой — основы визуализации. При рендеринге, в зависимости от настроек, сцена будет в виде изображений или видеофайла. В процессе рендеринга можно установить пиксельные размеры (640x480, 320x240) выходного файла. Чем больше пиксельные размеры, тем качественнее файл и тем больше расходуются компьютерные ресурсы. В настройках сохранения выходного файла можно работать с программами-компрессорами для сжатия файлов. Вообще 30 кадровый 6-секундный видеофайл занимает 300 мегабайт памяти. Конечно неудобно, что файл весит так много. При обработке файла компрессором его объем на десять-сто раз уменьшится. Уменьшение объема выходных файлов основная задача компрессора. Еще можно декорировать задний фон сцены по своему вкусу, используя различные эффекты, например, огонь, объемное освещение, эффект линзы. Учитывая нехватку электронных игр по некоторым темам школьных предметов, например, геометрия, физика, математика, в программе *3D Max* можно как раз таки создать игры, развивающие способности учеников.

По физике, когда изучаются некоторые физические, астрономические явления, во многих случаях ученикам они представляются лишь на страницах учебника. Эти примеры в виде изображения могут показаться не очень кра-

сочными. Проблема представления физических явлений никогда не исчезнет. Поэтому с помощью 3D Max была сделана постановка «Путешествие по миру», где показывались некоторые физические явления. Эта постановка состоит из трех сцен: Природа, Земля и Луна, Система Солнце. Эти сцены показывают определенную среду. Видеофайлы хоть и сделаны в программе 3D Max, но обрабатываются с помощью таких программ как Windows Movie Maker. К этой программе подключаются и звуковые файлы.

Природа это — зеленые трава, озера и деревья. Для построения модели земли создается плоскость.

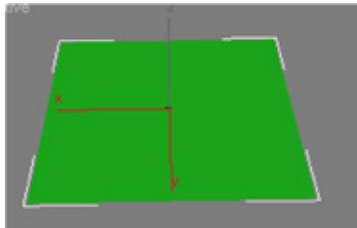


Рис. 1. Плоскость

На плоскость устанавливается модификатор Edit Mesh. Во вкладке Modify переходим на подобъектную уровень Vertex модификатора Edit Mesh и для того чтобы создать горы выбираем одну точку плоскости. Если тянуть одну точку вверх, то только эта точка будет тянуться вверх. Чтобы и точки, которые находятся рядом, тянулись вместе с выбранной точкой, то нужно установить флажок Use Soft Selection во вкладке Soft Selection и установить значение в счетчике Falloff. Тогда выбор увеличится. Далее можно тянуть точки вверх.

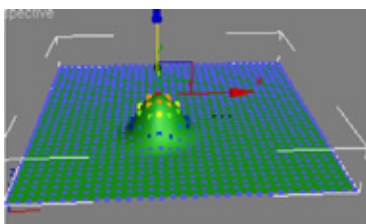


Рис. 2. Тянуть точку вверх

Таким образом вытягивая вверх точки создаются горы. Выйдя из подобъектного уровня, нужно сделать копию плоскости. Для этого надо выделить плоскость и не отпуская клавишу <Shift> надо тянуть ее на правую сторону и повернуть. Выполняя такие операции нужно скопиро-

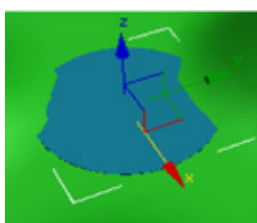


Рис. 3. Создание озера с помощью цилиндра

вать плоскость и поставив ее на другое место надо увеличить поверхность земли. Для того чтобы создать озеро можно использовать цилиндр. Свойства — радиус: 50; длина: 0,5, Sides: 32.

На это озеро устанавливается модификатор Noise. Далее на озеро устанавливается материал. Для этого нужно выбрать это озеро и в окне Material Editor настроить нужные параметры. Выбираем свободный слот и на материал нужно настроить основу Standard и метод рендеринга Blinn. И тогда слот примет следующий вид:

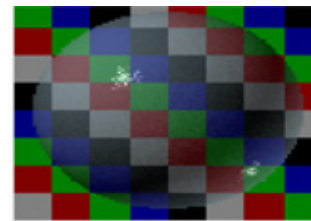


Рис. 4. Слот с материалом воды

Переходя в меню Maps на канал Reflection на основе карты Bitmap устанавливается любая картинка неба. На канал Reflection в счетчике Amount нужно поставить значение 30. Чтобы установить материал на озеро надо нажать на кнопку <Assign Material to Selection>. При выполнении рендеринга можно увидеть озеро. Скопировав озера можно увеличить число озер и чтобы они не были похожи друг на друга нужно менять каждый раз счетчик Seed.

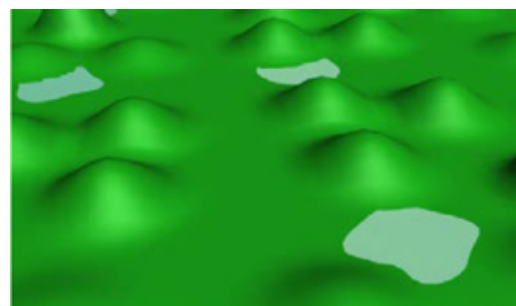


Рис. 5. Поверхность земли и озера

Необходимо создать большую трубу, которая окружит всю поверхность земли. Это будет модель неба. Для этого создадим объект Tube. На эту трубу установим материал неба. Переходим в меню Material Editor Maps, на канал Diffuse устанавливаем картинку неба, затем на тело устанавливаем материал.

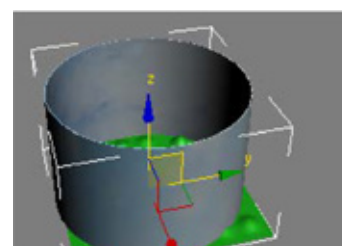


Рис. 6. Установление карты неба на трубу

Теперь, установив источник света и камеры, сняв с нескольких ракурсов эту модель природы, с помощью визуализации можно создать фильм о природе. Для того чтобы создать движение Земли и Луны, моделируются их движение. В окне Top создается сфера с радиусом 50 и сегментами 32. В будущем эта сфера будет моделью земли.

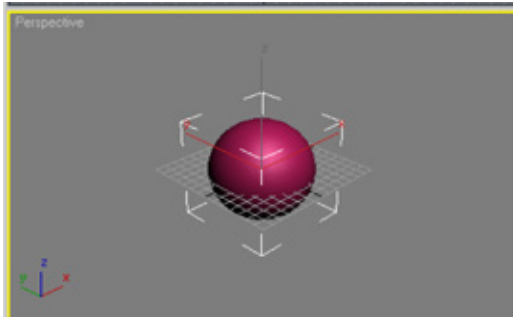


Рис. 7. Земля

В окне Top создается сплайн Circle, который находится во вкладке Shapes, он будет отображать путь Луны. Радиус которого равен на 150.

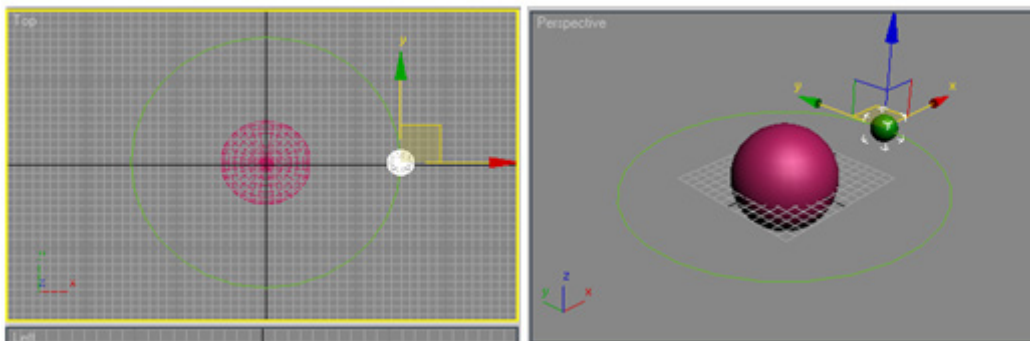


Рис. 9. Связать Луну с ее путем

Выделяя Землю проходим в окно Material Editor, затем во вкладке Maps находим канал Diffuse Color и нажимаем кнопку <None>, которая находится напротив него. В открывшийся в окне Material Map/Browser выбираем Bitmap, в диалоговом окне находим картинку земли и нажимаем на нее. И тогда первый слот примет вид земли. Затем необходимо нажать на кнопку Assign Material to

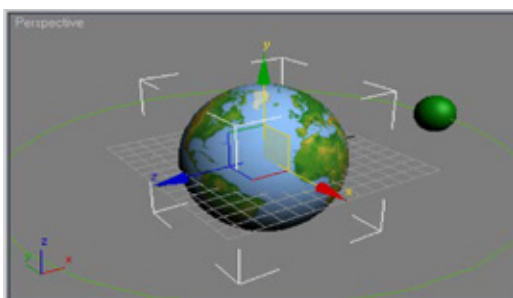


Рис. 10. Земля с установленной картой

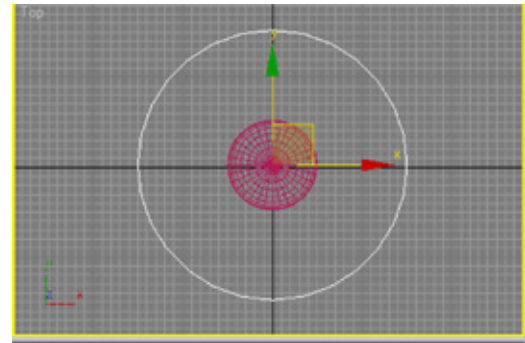




Рис. 8. Путь Луны

В окне Top создается сфера радиус которой равен на 15, а сегменты на 32. Эта сфера — Луна. Во вкладке Modifiers нужно написать названия соответствующие на эти три объекта: Земля — Earth, путь — PathMoon, Луна — Moon. Потом когда эти объекты будем использовать в других постановах ошибки не будут.

Теперь для того чтобы связать Луну и её путь, в главном меню выполняем команду Animation -> Constraints -> Path Constraint и выбираем мышкой объект PathMoon (круг). Тогда Луна расположится на путь

Selection . Для того чтобы карта была видна в окне перспектива нажимаем кнопку Show Map in Viewport .

Точно так выделяя объект луны в окне Material Editor, необходимо выбрать свободный слот и установить картинку луны. Прежде чем делать анимацию, надо щелкнуть правой кнопкой мыши линейку на панели анимаций и в открывшийся контекстном меню в разделе Configure включить все опции. После того как установится ограничитель Path Constraint по умолчанию в 0-х и в 100-х кадрах появятся ключи. Это означает что Луна будет вращаться один раз вокруг Земли. Можно менять эти ключи. Выделяя Луну, нужно пройти во вкладку Motion, которая находится в командной панели и в разделе Path Options находится счетчик Along Path. Если покрутка анимаций расположена на 0-ом кадре, то счетчик Along Path равен на 0. Если в 100-м кадре Along Path будет равен на 200, то луна будет вращаться вокруг земли 2 раза. Необходимые параметры надо установить и наблюдать за результатами.

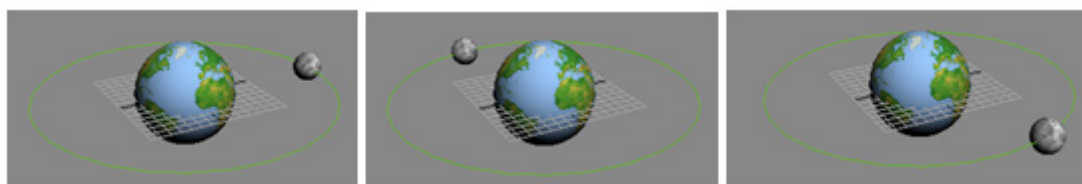


Рис. 11. Движение Луны вокруг Земли

Фильм состоит из тысячи роликов. Чтобы создать несколько роликов необходимо установить несколько камер. Готовые ролики нужно сгруппировать в один фильм. Это можно сделать в любой программе, обрабатывающей видео, в статье использована программа Movie Maker. Программа 3D Max не воспроизводит звук, поэтому озвучивание (звучание) тоже подключается к Movie Maker.

Солнечная система создается как система планет. Создаются 8–9 сфер, включая Солнце, у каждой радиусы, пути, материалы должны быть разными. В самом центре Солнце, затем Меркурий, Венера, Земля и ее спутники Луна, Марс, Юпитер, Сатурн, Уран и последний Нептун.

В центре Постановки создается сфера — Солнце. Затем путь каждой планеты создается с определенным радиусом с помощью круг сплайном Circle. После создаются планеты-сферы, которые расположенные на протяжений пути. Радиус каждой сферы вводится вручную.



Рис. 12. Создание планет Солнечной системы

Сатурн состоит из сферы и кольца. Параметры кольца: радиус первого кольца равен 140, радиус второго равен 40. Они присоединяются друг другу с помощью Boolean моделирования в режиме Union.

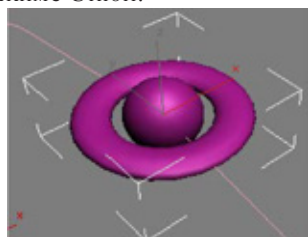


Рис. 13. Соединение сферы с кольцами

После создания каждой планеты нужно связать их путь, для этого выполним команду Animation -> Constraints -> Path Constraint. Для Луны создается круг вокруг Земли это будет её путь. Выбирая Луну выполняем команду Path Constraint, затем выбираем тот круг. После выполняется команда Animation -> Constraints -> Position Constraint и выбираем Землю.

Чтобы не перепутать планеты необходимо присвоить им имена на латинском языке. Например, солнце — Sun, Меркурий — Merk и т.д. После установления карт на них их общий вид будет выглядеть следующим образом:

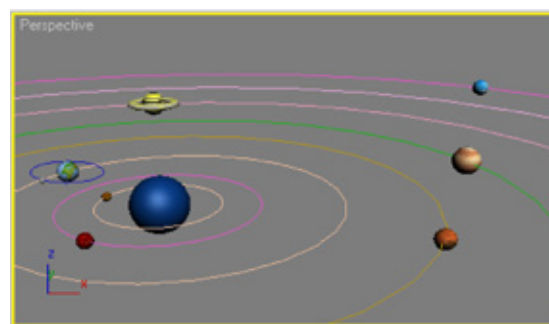


Рис. 14. Планеты с картами

В заключение можно сказать, что программа 3D Max — средство помощи для предметных преподавателей. Программу используют в процессе обучения в форме игр для развития кругозора детей.

Поэтому, чтобы усовершенствовать уровень знаний, студентов чтобы эффективно работать, чтобы обмениваться информацией и со временем внедрять новые технологии — применение 3D Max является правильным выбором.

Литература:

1. Миловская, О. С. Самоучитель 3ds Max 2009. СПб.: БХВ-Петербург, 2009. — 336 с.
2. Кротова, А. Ю. 3ds Max 2009 для начинающих. СПб.: БХВ-Петербург, 2009. — 352 с.
3. Рябцев, Д. В. Дизайн помещений и интерьеров в 3ds Max 2009 (+DVD). (Серия «Компьютерная графика и мультимедиа»). СПб.: Питер, 2009. — 512 с.
4. Владимир Верстак. 3ds Max 8. Секреты мастерства. СПб.: Питер, 2006. — 672 с.

Молодой ученый

Научный журнал
Выходит два раза в месяц

№ 9 (89) / 2015

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

Главный редактор:

Ахметова Г. Д.

Члены редакционной коллегии:

Ахметова М. Н.
Иванова Ю. В.
Каленский А. В.
Куташов В. А.
Лактионов К. С.
Сараева Н. М.
Авдеюк О. А.
Айдаров О. Т.
Алиева Т. И.
Ахметова В. В.
Брезгин В. С.
Данилов О. Е.
Дёмин А. В.
Дядюн К. В.
Желнова К. В.
Жуйкова Т. П.
Игнатова М. А.
Коварда В. В.
Комогорцев М. Г.
Котляров А. В.
Кузьмина В. М.
Кучерявенко С. А.
Лескова Е. В.
Макеева И. А.
Матроскина Т. В.
Мусаева У. А.
Насимов М. О.
Прончев Г. Б.
Семахин А. М.
Сенюшкин Н. С.
Ткаченко И. Г.
Яхина А. С.

Ответственные редакторы:

Кайнова Г. А., Осянина Е. И.

Международный редакционный совет:

Айрян З. Г. (Армения)
Арошидзе П. Л. (Грузия)
Атаев З. В. (Россия)
Борисов В. В. (Украина)
Велковска Г. Ц. (Болгария)
Гайич Т. (Сербия)
Данатаров А. (Туркменистан)
Данилов А. М. (Россия)
Досманбетова З. Р. (Казахстан)
Ешнев А. М. (Кыргызстан)
Игисинов Н. С. (Казахстан)
Кадыров К. Б. (Узбекистан)
Кайгородов И. Б. (Бразилия)
Каленский А. В. (Россия)
Козырева О. А. (Россия)
Куташов В. А. (Россия)
Лю Цзюань (Китай)
Малес Л. В. (Украина)
Нагервадзе М. А. (Грузия)
Прокопьев Н. Я. (Россия)
Прокофьева М. А. (Казахстан)
Ребезов М. Б. (Россия)
Сорока Ю. Г. (Украина)
Узаков Г. Н. (Узбекистан)
Хоналиев Н. Х. (Таджикистан)
Хоссейни А. (Иран)
Шарипов А. К. (Казахстан)

Художник: Шишков Е. А.

Верстка: Бурьянов П. Я.

Статьи, поступающие в редакцию, рецензируются.
За достоверность сведений, изложенных в статьях, ответственность несут авторы.
Мнение редакции может не совпадать с мнением авторов материалов.
При перепечатке ссылка на журнал обязательна.

Материалы публикуются в авторской редакции.

АДРЕС РЕДАКЦИИ:

420126, г. Казань, ул. Амирхана, 10а, а/я 231.
E-mail: info@moluch.ru
<http://www.moluch.ru/>

Учредитель и издатель:

ООО «Издательство Молодой ученый»

ISSN 2072-0297

Тираж 1000 экз.

Отпечатано в типографии издательства «Молодой ученый», г. Казань, ул. Академика Арбузова, д. 4