

GISAP:

PHYSICS, MATHEMATICS AND CHEMISTRY

International Academy of Science and Higher Education
London, United Kingdom
International Scientific Analytical Project

No 2 Liberal* | April 2014



Expert group:

Rena Kasumova (Azerbaijan), Nathan Lebrun (France), Yuri Khlopkov (Russia), Brian Hurst (UK)

Physics, mathematics and chemistry act as the most important element in the system of human knowledge – a conceptual core of the outlook.

On the one hand, these branches of knowledge cover the most large-scale directions of studies of key regularities of surrounding reality. And this circumstance reasonably gives them the status of fundamental sciences.

On the other hand, physical, mathematical and chemical axioms, models, functions or assumptions closely connect theoretical and applied spheres of human intelligence development.

It is known that disclosure of certain mysteries of elements structure and material objects interaction, apprehended and analyzed at fundamental level, in future predetermines the development of a set of branches of scientific gnoseology. It is connected with the fact that natural-science conclusions are extrapolated on various spheres of the scientific process in the most organic way. They stimulate the development of progressive innovations within these spheres.

Thus, contrary to the widespread false ideas, fundamental natural sciences in combination with the descriptive and analytical potential of mathematical methodology always have not sectoral, but general scientific nature practically in all their manifestations.

Thomas Morgan
Head of the IASHE International Projects Department
April 10, 2014



GISAP: Physico-Mathematical and Chemical Sciences №2 Liberal* (April, 2014)

Chief Editor – J.D., Prof., Acad. Pavlov V.V.

Copyright © 2014 IASHE

ISSN 2054-6483

ISSN 2054-6491 (Online)

Design: Yury Skoblikov, Helena Grigorieva, Alexander Stadnichenko

Published and printed by the International Academy of Science and Higher Education (IASHE)

1 Kings Avenue, London, N21 1PQ, United Kingdom

Phone: +442032899949, E-mail: office@gisap.eu, Web: <http://gisap.eu>

- ! No part of this magazine, including text, illustrations or any other elements may be used or reproduced in any way without
- the permission of the publisher or/and the author of the appropriate article.

Print journal circulation: 1000

«* - Liberal – the issue belongs to the initial stage of the journal foundation, based on scientifically reasonable but quite liberal editorial policy of selection of materials. The next stage of development of the journal («Professional») involves strict professional reviewing and admission of purely high-quality original scientific studies of authors from around the world».

CONTENTS

M. Blazheyevskiy, O. Koretnik , <i>National University of Pharmacy, Ukraine</i> OXIDATION-REDUCTION POTENTIAL OF THE SYSTEM OF PERPXP MONOSULPHANE/SULPHATE AND ITS DEPENDENCE ON THE pH MEDIUM.	3
I. Dytynchenko , <i>Zhytomyr Cooperative College of Business and Law, Ukraine</i> V. Listvan , <i>Zhytomyr Ivan Franko state University, Ukraine</i> HUDROXYCHALKONES AND THEIR ANALOGUES. SYNTHESIS WITH THE USE OF THE WITTIG REACTION	6
M. Quseynov , <i>Lankaran State University, Azerbaijan</i> RESEARCH OF GENOPROTECTIVE EFFECTIVENESS OF EXTRACTS FROM TEA LEAVES ON THE MUTATIONAL PROCESS INDUCED BY THE IONIZING RADIATION AND CHEMICAL MUTAGENS IN CELLS OF WHEAT AND BARLEY	11
V. Fedorov , <i>Tambov Dstate University named after G.R. Derzhavin, Russia</i> L. Kariyev, V. Novikov , <i>Tyumen State University, Russia</i> INTERACTION OF CLEAVAGE CRACKS WITH SLIPBANDS IN ALKALI-HALIDE CRYSTALS	16
Ya. Krasnoperov, M. Sklyarenko , <i>Perm State National Research University, Russia</i> EXPERIMENTAL DETERMINATION OF THE DEPENDENCE OF SPEED OF THE DYE MASS-TRANSFER IN THE FLAT HORIZONTAL LAYER OF LIQUID ON THE LAYER THICKNESS AT VARIOUS BOUNDARY CONDITIONS	18
V. Silenko , <i>Donetsk National University of Economics and Trade named after M. Tugan-Baranovsky, Ukraine</i> MORERA-TYPE THEOREM IN THE UNIT CIRCLE	22
T. Ivanova , <i>Moscow State Pedagogical University, Russia</i> PROPERTIES OF COVARIANCE IN DEPENDENCES BETWEEN INFORMATIONAL SIGNS. APPLICATION OF COEFFICIENTS OF CONTINGENCY SIMILARITY – YULE’S AND FISCHER’S CORRELATION COEFFICIENT IN THE ANALYSIS OF MISTAKES IN THE TECHNOLOGICAL INFORMATION PROCESSING CHAINS. DETERMINATION OF FLUCTUATIONS OF INFORMATION SIGNS IN TIME	24
R. Kasumova , <i>Baku state University, Azerbaijan</i> ON INCREASING THE EFFICIENCY OF FREQUENCY CONVERSION IN METAMATERIALS	27
N. Shazhdekeeva , <i>Atyrau State University named after Kh. Dosmukhamedov, Kazakhstan</i> ABOUT ONE INVERSE PROBLEM OF THE FILTRATION THEORY CONNECTED WITH CLARIFICATION OF COLLECTOR PROPERTIES OF THE BED IN OIL-AND-GAS DEPOSITS.	29
A. Kryukov , <i>Siberian Federal University, Russia</i> I. Kriukova , <i>General secondary school № 10, Krasnoyarsk, Russia</i> CONDITIONS OF CHANGE OF INDICATORS AND INDICATORNESS IN PHASES OF THE ORGANIZATION LIFE CYCLE	31
M. Ushcats , <i>Admiral Makarov National University of Shipbuilding, Ukraine</i> PROBLEM OF CONDENSATION IN STATISTICAL PHYSICS	34

CONTENTS

Блажеевский Н.Е., Коретник О.И., <i>Национальный фармацевтический университет, Украина</i> ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ СИСТЕМЫ ПЕРОКСОМОНОСУЛЬФАТ/СУЛЬФАТ И ЕГО ЗАВИСИМОСТЬ ОТ pH СРЕДЫ	3
Дытынченко И.Н., <i>Житомирский кооперативный колледж бизнеса и права, Украина</i> Листван В.Н., <i>Житомирский государственный педагогический университет им. И. Франко, Украина</i> ГИДРОКСИХАЛКОНЫ И ИХ АНАЛОГИ. СИНТЕЗ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕАКЦИИ ВИТТИГА	6
Гусейнов М.В., <i>Ленкоранский государственный университет, Азербайджан</i> ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕНОПРОТЕКТИВНОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЭКСТРАКТОВ ИЗ ЛИСТЬЕВ ЧАЯ НА МУТАЦИОННЫЙ ПРОЦЕСС, ИНДУЦИРОВАННЫЙ ИОНИЗИРУЮЩИМ ОБЛУЧЕНИЕМ И ХИМИЧЕСКИМИ МУТАГЕНАМИ В КЛЕТКАХ ПШЕНИЦЫ И ЯЧМЕНЯ	11
Фёдоров В.А., <i>Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, Россия</i> Карьев Л.Г., Новиков В.П., <i>Тюменский государственный нефтегазовый университет, Россия</i> ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТРЕЩИН СКОЛА С ПОЛОСАМИ СКОЛЬЖЕНИЯ В ШЕЛОЧНОГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ	16
Красноперов Я.И., Скляренко М.С., <i>Пермский государственный национальный исследовательский университет, Россия</i> ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАВИСИМОСТИ СКОРОСТИ МАССОПЕРЕНОСА КРАСИТЕЛЯ В ПЛОСКОМ ГОРИЗОНТАЛЬНОМ СЛОЕ ЖИДКОСТИ ОТ ТОЛЩИНЫ СЛОЯ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЯХ	18
Силенко В.Е., <i>Донецкий национальный университет экономики и торговли им. М. Туган-Барановского, Украина</i> ТЕОРЕМЫ ТИПА МОРЕРЫ В ЕДИНИЧНОМ КРУГЕ	22
Иванова Т.А., <i>Московский Государственный Педагогический университет, Россия</i> СВОЙСТВА КОВАРИАЦИИ В ЗАВИСИМОСТЯХ МЕЖДУ ИНФОРМАЦИОННЫМИ ПРИЗНАКАМИ. ПРИМЕНЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ СХОДСТВА КОНТИНГЕНЦИИ – ЮЛА И АССОЦИАЦИИ ФИШЕРА ПРИ АНАЛИЗЕ ОШИБОК В ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ЦЕПОЧКАХ ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ. ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЛЕБАНИЙ ИНФОРМАЦИОННЫХ ПРИЗНАКОВ ВО ВРЕМЕНИ	24
Kasumova R.J., <i>Baku State University, Azerbaijan</i> ON INCREASING THE EFFICIENCY OF FREQUENCY CONVERSION IN METAMATERIALS	27
Шаждекеева Н.К., <i>Атырауский государственный университет имени Х. Досмухамедова, Казахстан</i> ОБ ОДНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧЕ ТЕОРИИ ФИЛЬТРАЦИИ ПО УТОЧНЕНИЮ КОЛЛЕКТОРСКИХ СВОЙСТВ ПЛАСТА В НЕФТЕГАЗОВЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЯХ	29
Крюков А.Ф., <i>Сибирский федеральный университет, Россия</i> Крюкова И.А. <i>СШ №10 МО г. Красноярска, Россия</i> УСЛОВИЯ СМЕНЫ ИНДИКАТОРОВ И ИНДИКАТОРНОСТЬ В ФАЗАХ ЖИЗНЕННОГО ЦИКЛА ОРГАНИЗАЦИИ	31
Ушкац М.В., <i>Национальный университет кораблестроения им. адмирала Макарова, Украина</i> ПРОБЛЕМА КОНДЕНСАЦИИ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ.	34

**OXIDATION-REDUCTION POTENTIAL
OF THE SYSTEM
OF PERPXPMONOSULPHANE/SULPHATE
AND ITS DEPENDENCE
ON THE PH MEDIUM**

M. Blazheyevskiy, Doctor of Chemistry, Professor
O. Koretnik, postgraduate student
National University of Pharmacy, Ukraine

The electrochemical generalized equation of the protonic particles interaction of the oxidized and reduced forms of peroxomonosulphate/sulphate system was derived and the theoretical interpretation of the oxidation-reduction potential dependence on pH medium was given. It is shown that at the change in pH value the nature of chemical particles changes, consequently, the form of the electrochemical generalized equation transforms that brings to the dependence of the oxidation-reduction potential on medium pH. The numerical calculation of the dependence of E on pH was performed.

Keywords: peroxomonosulphate, oxidation-reduction potential, dependence on pH medium.

Conference participants, National championship
in scientific analytics, Open European and Asian
research analytics championship

**ОКИСЛИТЕЛЬНО-
ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ
СИСТЕМЫ ПЕРОКСОМОНОСУЛЬФАТ/
СУЛЬФАТ И ЕГО ЗАВИСИМОСТЬ
ОТ pH СРЕДЫ**

Блажеевский Н.Е., д-р хим. наук, проф.
Коретник О.И., аспирант
Национальный фармацевтический университет, Украина

Выведено обобщенное электрохимическое уравнение взаимодействия протонированных частиц окисленной и восстановленной форм системы пероксомоносульфат/сульфат и дана теоретическая интерпретация зависимости окислительно-восстановительного потенциала от pH среды. Показано, что при изменении pH изменяется природа химических частиц, а следовательно изменяется и вид обобщенного электрохимического уравнения взаимодействия, что ведет к зависимости окислительно-восстановительного потенциала от pH среды.

Ключевые слова: пероксомоносульфат, окислительно-восстановительный потенциал, зависимость от pH.

Участники конференции, Национального первенства
по научной аналитике, Открытого Европейско-Азиатского
первенства по научной аналитике

Известно, что стандартные потенциалы применимы для расчета равновесий в идеальных системах, когда можно пренебречь электростатическими взаимодействиями и конкурирующими химическими реакциями с участием окисленной и/или восстановленной формы. Стандартный окислительно-восстановительный потенциал электрода предусматривает потенциал системы при условии, когда активности окисленной и восстановленной форм равны между собой и равны 1 моль/л, при чем имеется в виду гипотетичный стандартный 1 моль/л раствор, в котором коэффициент активности каждого растворенного вещества равен 1.

Для уменьшения ошибок в расчетах, осуществляемых для реальных условий, преимущество предоставляют *формальным потенциалам*. Формальным потенциалом (φ^o) принято называть потенциал полуреакции при условии, когда концентрации (а не активности) окисленной и восстановленной форм равны 1 моль/л, а концентрации чужеродных электролитов известны [1]. В отличие от стандартного формальный потенциал включает в себе коэффициенты активности, то есть зависит от ионной силы раствора, а также величины pH. Если коэффициент активности равен 1 (например, в сильно разбавленных растворах при отсутствии конкурирующих равновесий), то формальный потенциал совпадает со стандартным потенциалом:

$$\varphi^o = \varphi^o + (0,059/n) \cdot \lg(\gamma_{Ox} / \gamma_{Red}) = \varphi^o.$$

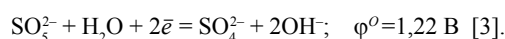
Точность такого приближения для многих расчетов оказывается достаточной.

Если константы конкурирующих равновесий и концентрации чужеродных электролитов (в том числе и ионов водорода, то есть pH раствора) известны, а ионная сила не слишком высока и ее влиянием можно пренебречь, то по данным величины стандартного потенциала полуреакции

можно рассчитать *формальный потенциал* и использовать его для дальнейших расчетов. Но при этом следует быть осторожным, так как пренебрежение каким-либо равновесием в системе может привести к большим (значимым) ошибкам [2].

При использовании достаточно разбавленных растворов ($c < 0,001$ моль/л) для расчетов можно воспользоваться отношением аналитических концентраций ионов в растворе.

Рассмотрим изменение окислительно-восстановительного потенциала полуреакции восстановления пероксомоносульфат-иона SO_5^{2-} до сульфат-иона SO_4^{2-} в щелочной среде при изменении pH среды:



Уравнение Нернста для этой системы имеет вид:

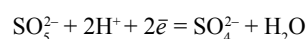
$$\varphi = \varphi^o - \frac{0,0592}{n} \lg \frac{[SO_5^{2-}]}{[SO_4^{2-}] \cdot [OH^-]^2}.$$

Пусть $c(SO_5^{2-}) = c(SO_4^{2-}) = 1$ моль/л. Для расчета окислительно-восстановительного потенциала любой реакции с участием протонов или гидроксид-ионов уравнение Нернста можно представить в виде:

$$\varphi = \varphi_{pH=0}^o - \frac{h}{n} 0,0592 \text{ pH} + \frac{0,0592}{n} \lg \frac{c_{Ox}}{c_{Red}}.$$

где h – количество протонов в полуреакции восстановления, записанной для кислой среды (pH = 0).

С другой стороны, полуреакция восстановления для кислой среды имеет вид:



(для этого достаточно условно добавить $2H^+$ к обеим частям уравнения полуреакции для щелочной среды и учесть реакцию нейтрализации). Видно, что $h = n = 2$. Теперь,

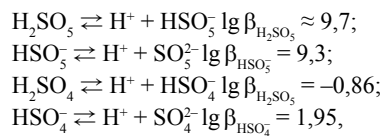
воспользовавшись значением стандартного потенциала для щелочной среды (pH = 14), найдем $\varphi_{\text{pH}=0}^0$:

$$\begin{aligned}\varphi_{\text{pH}=0}^0 &= \varphi_{\text{pH}=14}^0 + \frac{h}{n} \cdot 0,0592 \text{ pH} = \\ &= 1,22 + 0,0592 \cdot 14 = 2,05 \text{ В.}\end{aligned}$$

Таким образом, из полученных данных видно, что пероксомоносульфат-ион в кислой среде является достаточно сильным окислителем. В целом можно сделать также вывод, что повышение кислотности среды усиливает окислительные свойства пероксомоносульфата.

Зависимость окислительно-восстановительного потенциала от pH среды системы пероксомоносульфат/сульфат

Окисленная HSO_5^- и восстановленная HSO_4^- формы системы являются слабой и сильной кислотами соответственно, поэтому наряду с реакциями окисления-восстановления протекают реакции депротонирования:



где $\beta_{\text{H}_2\text{SO}_5}$ и $\beta_{\text{H}_2\text{SO}_4}$ – общие константы образования (устойчивости) протонированных частиц окисленной H_2SO_5 и восстановленной H_2SO_4 форм системы.

Обобщенное электрохимическое уравнение взаимодействия для системы пероксомоносульфат/сульфат имеет вид (здесь заряды частиц и в дальнейшем опущены, кроме некоторых принципиальных случаев):

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^2 \alpha_{\text{H}_2\text{SO}_5} \cdot \text{H}_2\text{SO}_5 + \left(2 + \sum_{i=1}^2 i \cdot \alpha_{\text{H}_2\text{SO}_4} - \sum_{i=1}^2 i \cdot \alpha_{\text{H}_2\text{SO}_5} \right) \cdot \text{H}^+ + 2\bar{e} = \\ = \sum_{i=0}^2 \alpha_{\text{H}_2\text{SO}_4} \cdot \text{H}_2\text{SO}_4 + \text{H}_2\text{O}.\end{aligned}$$

Необходимость введения в это уравнение молекул воды объясняется тем, что окисленная и восстановленная формы содержат разное количество атомов кислорода. Это уравнение представляет собой линейную комбинацию более простых химических и электрохимических уравнений, причем функции $\alpha_{\text{H}_2\text{SO}_5}$ и $\alpha_{\text{H}_2\text{SO}_4}$ выражают не только парциальные молярные доли частиц химических уравнений депротонирования и образование этих частиц в обобщенном электрохимическом уравнении взаимодействий

$$\begin{aligned}\alpha_{\text{H}_2\text{SO}_5} &= \frac{[\text{H}_2\text{SO}_5]}{\sum_{i=0}^p [\text{H}_2\text{SO}_5]} = \frac{\beta_{\text{H}_2\text{SO}_5} \cdot [\text{H}^+]^i}{1 + \sum_{i=1}^p \beta_{\text{H}_2\text{SO}_5} \cdot [\text{H}^+]^i}, \\ \alpha_{\text{H}_2\text{SO}_4} &= \frac{[\text{H}_2\text{SO}_4]}{\sum_{i=0}^p [\text{H}_2\text{SO}_4]} = \frac{\beta_{\text{H}_2\text{SO}_4} \cdot [\text{H}^+]^i}{1 + \sum_{i=1}^p \beta_{\text{H}_2\text{SO}_4} \cdot [\text{H}^+]^i}.\end{aligned}$$

Зависимость окислительно-восстановительного потенциала от pH для этой системы относительно стандартного водородного электрода может быть выражена уравнением:

$$E = E_{\text{SO}_5^{2-}/\text{SO}_4^{2-}}^0 - \frac{RT}{2F} \cdot \ln \frac{1 + \sum_{i=1}^p \beta_{\text{H}_2\text{SO}_5} \cdot [\text{H}^+]^i}{1 + \sum_{i=1}^q \beta_{\text{H}_2\text{SO}_4} \cdot [\text{H}^+]^i} + \frac{RT}{2F} \cdot \ln \frac{c(\text{H}_2\text{SO}_5)}{c(\text{H}_2\text{SO}_4)}.$$

или

$$\begin{aligned}E = E_{\text{SO}_5^{2-}/\text{SO}_4^{2-}}^0 - \frac{RT}{2F} \cdot \ln \frac{\prod_{i=1}^2 \beta_{\text{H}_2\text{SO}_5}^{\alpha_{\text{H}_2\text{SO}_5}}}{1 + \sum_{i=1}^2 \beta_{\text{H}_2\text{SO}_4} \cdot [\text{H}^+]^i} + \\ + \frac{RT}{2F} \cdot \ln \frac{\prod_{i=0}^2 \alpha_{\text{H}_2\text{SO}_5}^{\alpha_{\text{H}_2\text{SO}_5}}}{\prod_{i=0}^2 \alpha_{\text{H}_2\text{SO}_4}^{\alpha_{\text{H}_2\text{SO}_4}}} + \frac{RT}{2F} \ln [\text{H}^+]^{2+\bar{q}-\bar{p}} + \frac{RT}{2F} \cdot \ln \frac{c(\text{H}_2\text{SO}_5)}{c(\text{H}_2\text{SO}_4)}.\end{aligned}$$

Тут

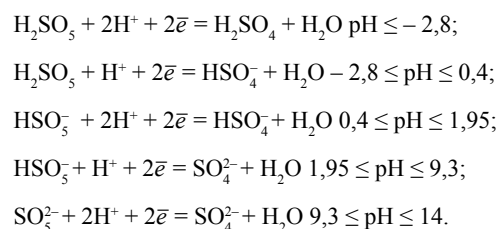
$$\bar{p} = \sum_{i=1}^p i \cdot \alpha_{\text{H}_2\text{SO}_5} = \frac{\beta_{\text{HSO}_5^-} + 2\beta_{\text{H}_2\text{SO}_5} \cdot [\text{H}^+]^2}{1 + \beta_{\text{HSO}_5^-} \cdot [\text{H}^+] + \beta_{\text{H}_2\text{SO}_5} \cdot [\text{H}^+]^2},$$

$$\bar{q} = \sum_{i=1}^p i \cdot \alpha_{\text{H}_2\text{SO}_4} = \frac{\beta_{\text{HSO}_4^-} + 2\beta_{\text{H}_2\text{SO}_4} \cdot [\text{H}^+]^2}{1 + \beta_{\text{HSO}_4^-} \cdot [\text{H}^+] + \beta_{\text{H}_2\text{SO}_4} \cdot [\text{H}^+]^2}.$$

Это уравнение аналогично полученному нами в [4–6]. Для приблизительного расчета зависимости $E=f(\text{pH})$ следует сначала определить участки доминирования частиц в растворе в зависимости от pH. Последнее определяется константами депротонирования (диссоциации) частиц окисленной и восстановленной форм. Далее непрерывные функции $\alpha_{\text{H}_2\text{SO}_5}$, $\alpha_{\text{H}_2\text{SO}_4}$, \bar{p} и \bar{q} заменяются на кусочно-линейные функции. Для системы пероксомоносульфат/сульфат имеем:

$$\begin{aligned}\text{H}_2\text{SO}_5 - 2,8 \leq \text{pH} \leq 0,4; \alpha_{\text{H}_2\text{SO}_5} = 1; \alpha_{\text{HSO}_5^-} = \alpha_{\text{SO}_5^{2-}} = 0; \bar{p} = 2; \\ \text{HSO}_5^- - 0,4 \leq \text{pH} \leq 9,3; \alpha_{\text{HSO}_5^-} = 1; \alpha_{\text{H}_2\text{SO}_5} = \alpha_{\text{SO}_5^{2-}} = 0; \bar{p} = 1; \\ \text{SO}_5^{2-} - 9,3 \leq \text{pH} \leq 14; \alpha_{\text{SO}_5^{2-}} = 1; \alpha_{\text{H}_2\text{SO}_5} = \alpha_{\text{HSO}_5^-} = 0; \bar{p} = 0; \\ \text{HSO}_4^- - 2,8 \leq \text{pH} \leq 1,95; \alpha_{\text{HSO}_4^-} = 1; \alpha_{\text{H}_2\text{SO}_4} = 0; \alpha_{\text{SO}_4^{2-}} = 0; \bar{q} = 1; \\ \text{SO}_4^{2-} - 1,95 \leq \text{pH} \leq 14; \alpha_{\text{SO}_4^{2-}} = 1; \alpha_{\text{H}_2\text{SO}_4} = 0; \alpha_{\text{HSO}_4^-} = 0; \bar{q} = 0.\end{aligned}$$

На основании этих данных система электрохимических уравнений взаимодействия частиц окисленной и восстановленной форм, участки доминирования которых перекрываются, имеет вид:



Согласно вышеприведенному уравнению зависимости E от pH с учетом значений функций образования Бьерума \bar{p} и \bar{q} , а также молярных долей $\alpha_{\text{H}_2\text{SO}_5}$ и $\alpha_{\text{H}_2\text{SO}_4}$ этим уравнениям соответствуют такие линейные функции $E=f(\text{pH})$:

$$\begin{aligned}E = E_{\text{SO}_5^{2-}/\text{SO}_4^{2-}}^0 - \frac{RT}{2F} \cdot \ln \frac{\beta_{\text{H}_2\text{SO}_5}}{\beta_{\text{H}_2\text{SO}_4}} + \frac{RT}{2F} \ln [\text{H}^+]^2 + \\ + \frac{RT}{2F} \cdot \ln \frac{c(\text{H}_2\text{SO}_5)}{c(\text{H}_2\text{SO}_4)} \text{ pH} \leq -2,8;\end{aligned}$$

$$E = E_{\text{SO}_3^{2-}/\text{SO}_4^{2-}}^{\circ} - \frac{RT}{2F} \cdot \ln \frac{\beta_{\text{H}_2\text{SO}_3}}{\beta_{\text{HSO}_3^-}} + \frac{RT}{2F} \ln[\text{H}^+] + \frac{RT}{2F} \cdot \ln \frac{c(\text{H}_2\text{SO}_3)}{c(\text{H}_2\text{SO}_4)} - 2,8 \leq \text{pH} \leq 0,4;$$

$$E = E_{\text{SO}_3^{2-}/\text{SO}_4^{2-}}^{\circ} - \frac{RT}{2F} \cdot \ln \frac{\beta_{\text{HSO}_3^-}}{\beta_{\text{HSO}_4^-}} + \frac{RT}{2F} \ln[\text{H}^+]^2 + \frac{RT}{2F} \cdot \ln \frac{c(\text{H}_2\text{SO}_3)}{c(\text{H}_2\text{SO}_4)} 0,4 \leq \text{pH} \leq 1,95;$$

$$E = E_{\text{SO}_3^{2-}/\text{SO}_4^{2-}}^{\circ} - \frac{RT}{2F} \cdot \ln \beta_{\text{HSO}_3^-} + \frac{RT}{2F} \ln[\text{H}^+] + \frac{RT}{2F} \cdot \ln \frac{c(\text{H}_2\text{SO}_3)}{c(\text{H}_2\text{SO}_4)} 1,95 \leq \text{pH} \leq 9,3;$$

$$E = E_{\text{SO}_3^{2-}/\text{SO}_4^{2-}}^{\circ} + \frac{RT}{2F} \ln[\text{H}^+]^2 + \frac{RT}{2F} \cdot \ln \frac{c(\text{H}_2\text{SO}_3)}{c(\text{H}_2\text{SO}_4)} 9,3 \leq \text{pH} \leq 14.$$

Результаты расчета E зависимости от pH по этим формулам представлены на рис. ($c_{\text{H}_2\text{SO}_3} = c_{\text{H}_2\text{SO}_4} = 1$ моль/л). Были также проведены расчеты составляющих уравнения окислительно-восстановительного потенциала: первые два члена в уравнении выражают зависимость эффективного (формального) стандартного потенциала от pH. Расчеты показали также, что третьим слагаемым можно пренебречь.

Таким образом, обобщенное электрохимическое уравнение взаимодействия позволяет учесть вклад всех частиц в процесс равновесия.

При изменении pH раствора изменяется природа химических частиц, а, следовательно, изменяется и вид обобщенного электрохимического уравнения взаимодействия, что и приводит к зависимости E от pH как это показано на рисунке.

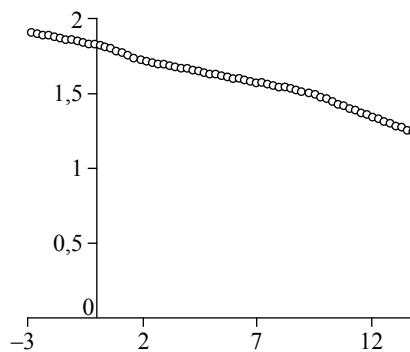
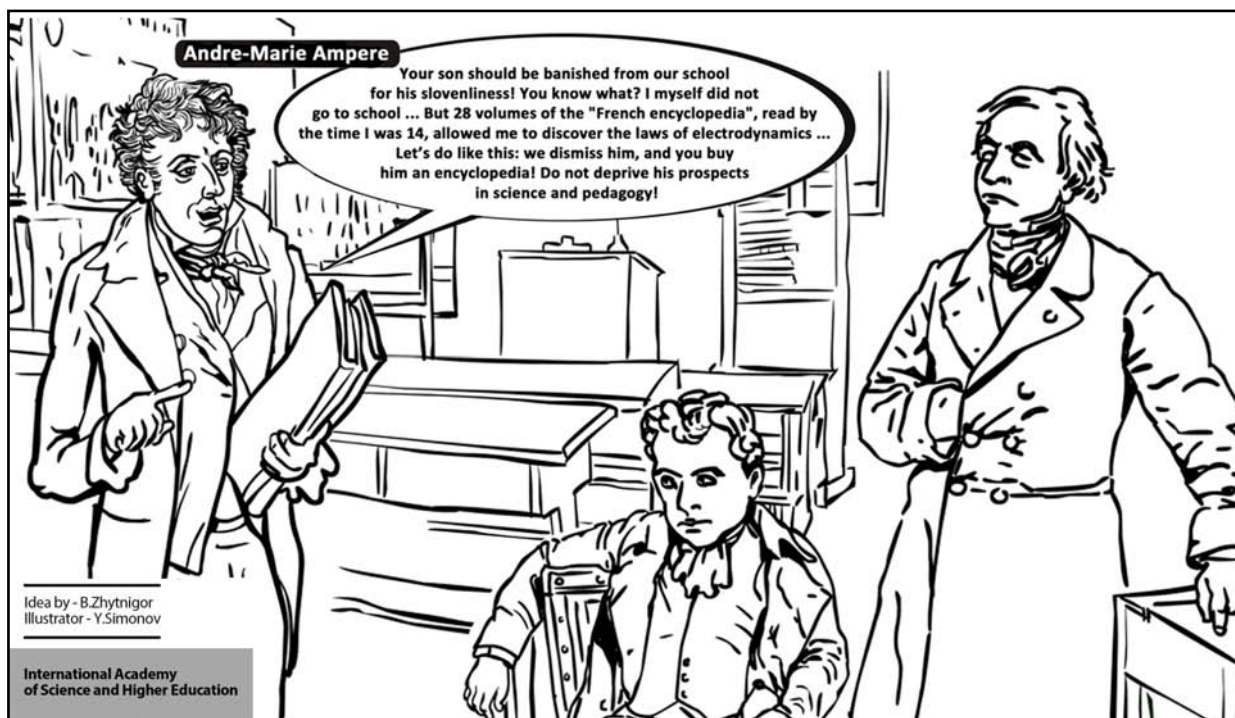


Рис. Зависимость окислительно-восстановительного потенциала от pH среды системы пероксомоносульфат/сульфат

References:

1. Дорохова Е.Н., Прохорова Г.В. Задачи и вопросы по аналитической химии. – М.: Мир, 2001. – 267 с.
2. Окредметрия / Под ред. Б.П. Никольского, В.В. Пальчевского. – Л.: Химия, 1975. – 304 с.
3. Spiro M. The standard potential of the peroxosulphate/sulphate couple // *Electrochem. Acta.* – 1979. – V. 24. – P. 313-314.
4. Блажеевский Н.Е., Зинчук В.К. Окислительно-восстановительный потенциал растворов пероксикарбоновых кислот // *Журн. физ. химии.* – 1990. – Т.64, №2. – С. 499-501.
5. Блажеевський М. Окисно-відновний потенціал аліфатичних пероксикарбонових кислот // *Вісн. Львів. у-ту. Серія. хім.* – 2002. – Вип. 42, Ч. 2. – С. 122-125.
6. Блажеевський М. Рівняння окисно-відновного потенціалу пероксикарбонових кислот у загальному вигляді // *Вісн. Львів. у-ту. Серія. хім.* – 2002. – Вип. 42, Ч. 2. – С. 118-121.



Idea by - B.Zhytnigor
Illustrator - Y.Simonov

International Academy
of Science and Higher Education

HUDROXYCHALKONES AND THEIR ANALOGUES. SYNTHESIS WITH THE USE OF THE WITTIG REACTION

I. Dytynchenko¹, lecturer
 V. Listvan², Candidate of Chemistry, Senior Lecturer
 Zhytomyr cooperative college of business and law, Ukraine¹
 Zhytomyr Ivan Franko State University, Ukraine²

Synthesis of new hydroxychalkones and their analogs have been made on the base of aromatic and heterocyclic aldehydes with phosphonium salts.

Method of Wittig reaction in the presence of triethyl amine have been elaborated.

The compounds obtained can possess an appreciable physiological activity and valuable pharmacological action, they also are interesting as semi-product for synthesis of flavon type compounds.

Conference participants, National championship in scientific analytics, Open European and Asian research analytics championship

На современном этапе развития человечества известно большое количество синтетических органических соединений, которые используются в самых различных отраслях промышленности, а также в медицине, быту и т.д. Однако поиск новых препаратов не утратил своей актуальности и привлекает внимание многих исследователей.

Соединения с двойной связью P=C – фосфорилиды (алкилиденфосфораны) – относительно новый и недостаточно изученный класс фосфорорганических веществ. Они известны прежде всего как исходные соединения в реакции с альдегидами (реакция Виттига) для получения сложных органических соединений со связью C=C.

В настоящее время реакция Виттига настолько широко используется, что с момента ее открытия трудно указать область органической химии, где бы она не нашла своего применения. Ее широко используют при синтезе ненасыщенных соединений алифатического, ароматического и гетероциклического рядов. Она применяется в области элементоорганических соединений, но особенно полезной оказалась при синтезе природных соединений (каротиноидов, стероидов, витамина D₂), их аналогов, а также физиологически активных веществ. За открытие этой реакции Г. Виттиг в 1979 г. был удостоен Нобелевской премии по химии.

Целью работы было:

- получение новых гидроксихалконов и их аналогов, используя в реакции Виттига ароматические альдегиды и фосфониевые соли;
- подбор основных методик и установка наиболее благоприятных условий, при которых выход этих веществ наибольший;
- исследование их свойств.

Исследование проводилось с помощью методов органического синтеза, методов выделения и очистки органических веществ, спектроскопии.

Фосфониевые соли являются исходными веществами для синтеза ненасыщенных соединений, аналогов гидроксихалконов по реакции Виттига. Суть её заключается

ГИДРОКСИХАЛКОНЫ И ИХ АНАЛОГИ. СИНТЕЗ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕАКЦИИ ВИТТИГА

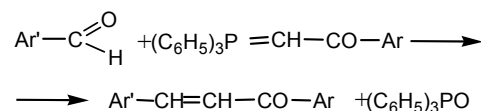
Дытынченко И.Н.¹, преподаватель
 Листван В.Н.², канд. хим. наук, ст. преподаватель
 Житомирский кооперативный колледж бизнеса и права, Украина¹
 Житомирский государственный педагогический университет им. И. Франко, Украина²

Проведен синтез ряда новых гидроксохалконов и их аналогов на основе ароматических и гетероциклических альдегидов с фосфониевыми солями. Разработана методика проведения реакции Виттига в присутствии триэтиламина. Полученные вещества могут проявлять физиологическую активность, полезное фармакологическое действие, а также интересны в плане использования производных гидроксохалконов как соединений для синтеза веществ ряда флавонов.

Участники конференции, Национального первенства по научной аналитике, Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

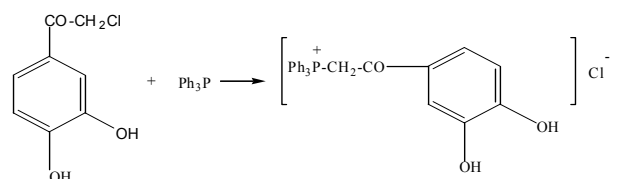
в том, что фосфониевые соли при действии оснований превращаются в алкилиденфосфораны, далее взаимодействуют с ароматическими альдегидами с непосредственным образованием ненасыщенных кетонов, аналогов халконов.

Реакция проходит по следующей схеме:

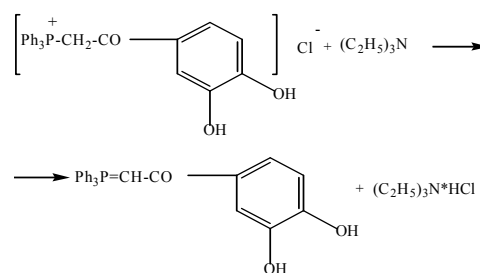


В результате реакции образуется производная халкона и трифенилфосфиноксид. Исходным веществом в синтезах является реактив – хлоркетон (2-хлор-3',4'-дигидроксиацетофенон). Это кристаллическое вещество с температурой плавления 174–176°C.

Реакция хлоркетона с трифенилфосфином образует фосфониевую соль:



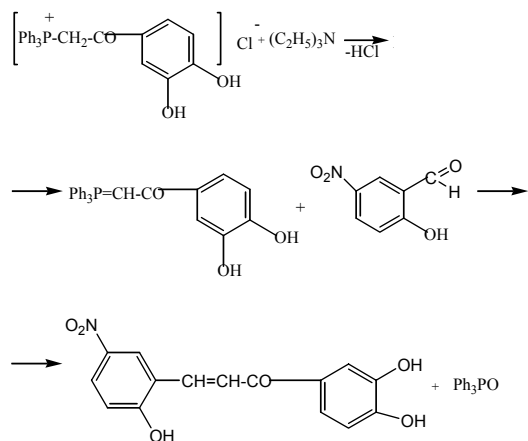
Данная реакция имеет важное практическое значение, поскольку фосфониевая соль является основным исходным соединением (полупродуктом) для следующих синтезов производных гидроксихалконов. Для отщепления HCl от фосфониевой соли и превращения ее в фосфорилид было использовано достаточно сильное основание – триэтиламин.



Часто с этой целью используют алкоголяты или металлоорганические соединения фениллитий или бутиллитий. Оказалось, что для получения илидов из солей достаточно такого основания как триэтиламин, с которым безусловно удобнее работать, чем с чувствительными к влаге алкоголятами или тем более металлоорганическими основаниями. Использование триэтиламина дает возможность проводить реакцию Виттига в одну стадию с использованием фосфониевых солей без предварительного выделения из них алкилиденфосфоранов. Реакция Виттига проходит в мягких условиях при комнатной температуре, нагрев необходим лишь в условиях малорастворимых альдегидов. Удобными растворителями для проведения реакции являются низшие спирты (этанол, 2-пропанол), в которых легко растворяется исходная фосфониевая соль, а продукты выпадают в осадок. В результате синтеза гидроксихалконов, их аналогов на основе ароматических альдегидов и дигидроксифосфониевой соли, гетероциклических аналогов гидроксихалконов получено 15 новых производных гидроксихалконов, содержащих фрагменты 5-нитрофурфурала, 5-фенилфурфурала, 1-нафтольного альдегида, нитросалицилового альдегида, ванилина и различные функциональные группы. Наиболее энергично происходят реакции с ароматическими альдегидами. Синтез халконов с гетероциклами в молекулах идет медленнее и с небольшим выходом.

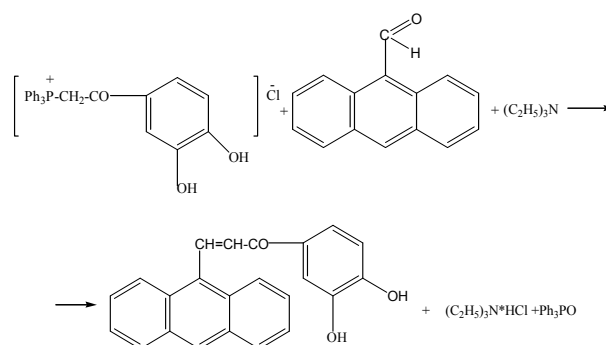
В результате синтеза гидроксихалконов, их аналогов на основе ароматических альдегидов и дигидроксифосфониевой соли, гетероциклических аналогов гидроксихалконов получен ряд производных гидроксихалконов, привлекающих внимание:

а) с 5-нитросалициловым альдегидом с образованием 1-(3,4-дигидроксифенил)-3-(2-гидрокси-5-нитрофенил) пропена:



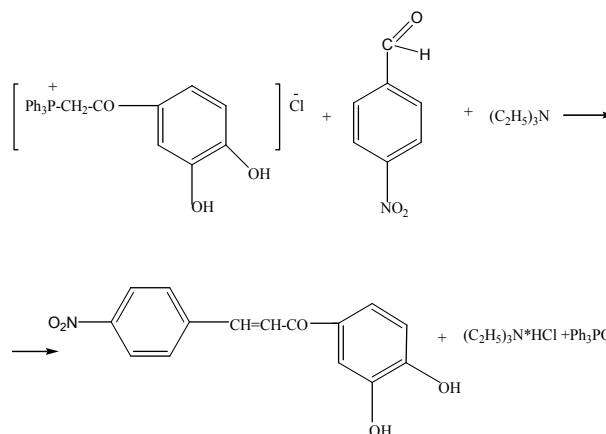
Производные салицилового альдегида – салициламид, аспирин (ацетилсалициловая кислота), натрий салицилат облагают жаропонижающим действием, фениловый эфир салициловой кислоты (фенилсалицилат) под названием салол используется в медицине как дезинфицирующее средство при некоторых кишечных заболеваниях. Поэтому полученное соединение может иметь ярко выраженные физиологические свойства и проявлять высокое антимикробное действие.

б) с 9-антраценкарбамидом:



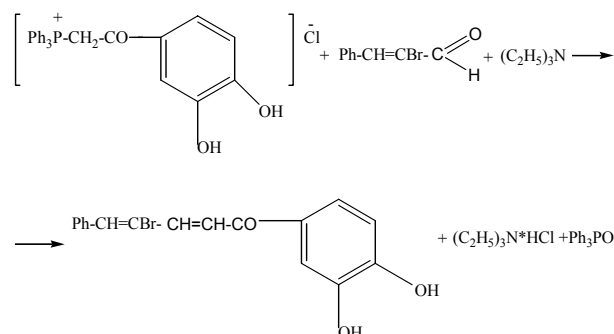
Большое значение как люминофоры имеют антрацен и его производные, которые интенсивно люминесцируют в кристаллах и растворах на границе УФ и видимой областей спектра. Антрацен используют для получения сцинтилляционных монокристаллов, а 9,10-дифенилантрацен, который относится к числу наиболее эффективных люминофоров фиолетового света, в оптических квантовых генераторах, в бессеребряной фотографии. Поэтому можно прогнозировать, что образованное вещество может обладать свойствами органического люминофора.

в) с п-нитробензальдегидом:



Продукт реакции интересен тем, что объединяет остатки бензойной кислоты и фосфониевой соли. Бензойная кислота и её производные применяются в медицине в качестве противомикробного, фунгицидного и отхаркивающего средств. Поэтому полученное соединение может иметь высокую физиологическую активность и может найти применение в медицине как аналог бензойной кислоты.

г) с α-бромкоричным альдегидом:



Данное вещество является особенно интересным. Это ненасыщенный кетон, который содержит две двойные связи фрагмент α -бромкоричной кислоты, является важным фармакологическим соединением. Ингибирует ряд ферментов замедляет развитие некоторых микроорганизмов и грибов. Именно поэтому полученный халкон при дальнейшем его фармакологическом анализе может проявлять антимикробное и фунгицидное действие или противопопалительные свойства.

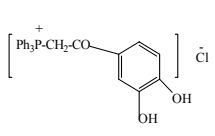
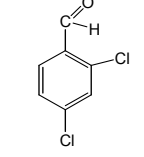
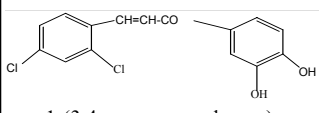
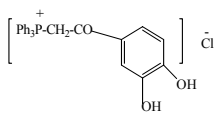
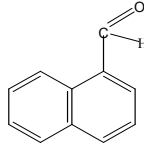
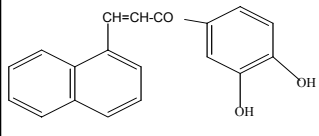
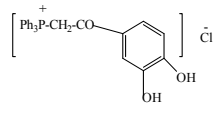
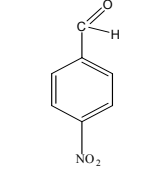
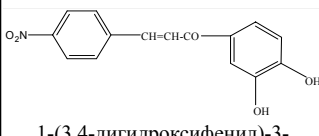
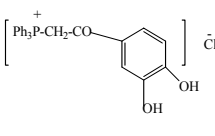
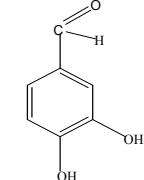
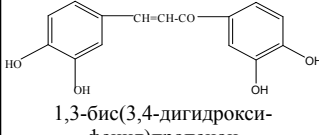
Для подтверждения строения полученных веществ использовались некоторые прямые и косвенные методы. В частности, уже сам метод, использованный для их синтеза, – реакция Виттига – хорошо известная, изученная реакция. На многочисленных примерах доказано, что она дает предполагаемые продукты с заданным расположением двойной связи даже при синтезе достаточно сложных соединений. Продукты очищались преимущественно

но перекристаллизацией из различных растворителей. Сравнивались свойства исходных веществ и продуктов реакции. Для некоторых веществ сняты спектры ЯМР. Они подтверждают структурные формулы этих соединений. Это уже прямое доказательство строения соединений, спектры которых сняты, и вместе с тем некоторое подтверждение для других веществ, поскольку для синтезов использовался тот же метод и преимущественно те же основные исходные вещества – фосфониевые соли и альдегиды.

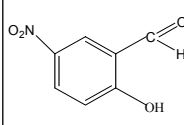
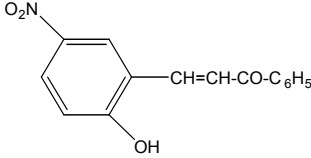
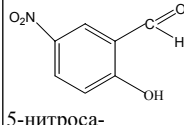
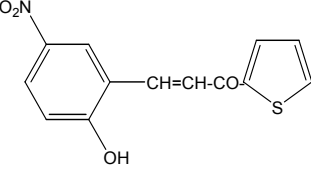
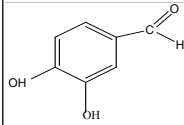
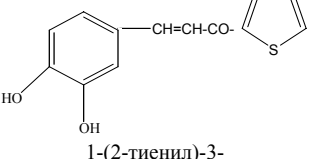
Полученные на основе ароматических и гетероциклических альдегидов производные халконы могут иметь заметную физиологическую активность, полезное фармакологическое действие при проведении соответствующих исследований, а также быть интересными в плане использования производных гидроксихалконов в качестве исходных веществ для синтеза соединений ряда флавонов.

Таблица 1.

Сравнительная таблица свойств гидроксихалконов и их аналогов

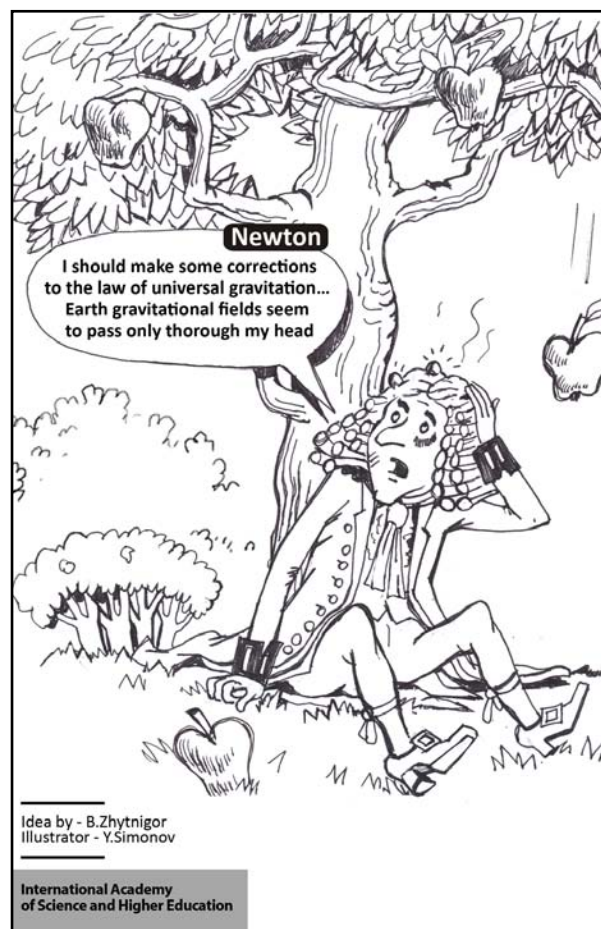
№ п/п	Фосфониевая соль	Альдегид	Продукт реакции	Mr	Практ. выход, %	Физическое состояние	T _{пл.} , °C	Растворитель
1	 3,4-дигидроксибензоилметил-(трифенил)-фосфоний хлорид	 дихлоробензальдегид	 1-(3,4-дигидроксифенил)-(2,4-дихлорофенил)-пропенон	309,1	37 %	Белый кристаллический осадок	207-208	2-пропанол, CCl ₄ петролейный эфир
2	 3,4-дигидроксибензоилметил-(трифенил)-фосфоний хлорид	 нафталенкарбальдегид	 1-(3,4-дигидроксифенил)-3-(1-нафтил)пропенон	290,3	58 %	Маслянистое вещество		2-пропанол, CCl ₄ петролейный эфир
3	 3,4-дигидроксибензоилметил-(трифенил)-фосфоний хлорид	 нитробензальдегид	 1-(3,4-дигидроксифенил)-3-(4-нитрофенил)-пропенон	285,3	62 %	Порошок жёлтого цвета	254	2-пропанол
4	 3,4-дигидроксибензоилметил-(трифенил)-фосфоний хлорид	 3,4-дигидроксибензальдегид	 1,3-бис(3,4-дигидроксифенил)пропенон	272,3	48 %	Коричневый осадок	258	2-пропанол

№ п/п	Фосфониевая соль	Альдегид	Продукт реакции	Mг	Практ. выход, %	Физическое состояние	T _{пл.} , °C	Растворитель
5		 4-гидрокси-3-метокси-бензальдегид	 1-(3,4-дигидроксифенил)-3-(4-гидрокси-3-метоксифенил)пропенон	286,3		Маслянистый чёрный продукт		2-пропанол C ₂ H ₅ OH, CHCl ₃
6		 нитросалициловый альдегид	 1-(3,4-дигидроксифенил)-3-(2-гидрокси-5-нитрофенил)пропенон	301,2	78 %	Мелкокристаллический жёлтый осадок	150-160	2-пропанол
7		 п-диметил-аминобензальдегид	 1-(3,4-дигидрокси-фенил)-3-(4-диметиламино-фенил)пропенон	283,3		Светлые игольчатые кристаллы	250-252	2-пропанол, CCl ₄
8		 антрацен-карбальдегид	 1-(3,4-дигидроксифенил)-3-(9-антрил)пропенон	340,4	40 %	Кристаллы коричневого цвета	255-256	2-пропанол
9		 α-бромокоричный альдегид (2-бromo-3-фенилпропеналь)	 1-(3,4-дигидроксифенил)-4-бром-5-фенил-2,4-пентадиен	345,3		Маслянистое красное вещество		2-пропанол
10		 5-фенил-фурфураль	 1-(3,4-дигидроксифенил)-3-(5-фенил-2-фурил)пропенон	306,3	20 %	Игольчатый светлый осадок	215-216	2-пропанол, CCl ₄
11		 5-(3-нитро-фенил)-фурфураль	 1-(3,4-дигидроксифенил)-3-[2-(3-нитрофенил)-фурил]пропенон	351,4		Чёрное маслянистое вещество		2-пропанол
12		 5-нитрофурфураль	 1-(3,4-дигидроксифенил)-3-(5-нитро-2-фурил)пропенон	275,2	59	Коричневый осадок	226-227	2-пропанол

№ п/п	Фосфониевая соль	Альдегид	Продукт реакции	Mr	Практ. выход, %	Физическое состояние	T _{пл.} , °С	Растворитель
13	$\left[\text{Ph}_3\text{P}^+\text{CH}_2\text{CO-C}_6\text{H}_5 \right] \text{Br}^-$	 5-нитросалициловый альдегид	 1-фенил-3-(2-гидрокси-5-нитрофенил)пропенон	255,3	79	Мелкокристаллический желтый осадок	198-200	2-пропанол
14	$\left[\text{Ph}_3\text{P}^+\text{CH}_2\text{CO-C}_4\text{H}_3\text{S} \right] \text{Br}^-$	 5-нитросалициловый альдегид	 1-(2-тиенил)-3-(2-гидрокси-5-нитрофенил)пропенон	275,3	70	Кристаллический коричневый осадок	235-236	2-пропанол
15	$\left[\text{Ph}_3\text{P}^+\text{CH}_2\text{CO-C}_4\text{H}_3\text{S} \right] \text{Br}^-$	 3,4-дигидроксибензаль-дегид	 1-(2-тиенил)-3-(3,4-дигидроксифенил)-пропенон	246,3	23	Желто-коричневый порошок		2-пропанол CCl ₄

References:

1. Маеркер А. Реакция Виттига. // Органические реакции. – М.: Мир, 1967.-т.14. – С. 287-382.
2. Общая органическая химия./ Под. ред. Д. Бартона и У.Д. Оллиса. Т.4. Карбоновые кислоты и их производные. Соединения фосфора. / Под ред. О.И. Сазерленда. – М.: Химия, 1983. – 728 с.
3. Смит В., Бочков А., Кейпл Р. Органический синтез. Наука и искусство: Пер. с англ. – М.: Мир, 2001. – 573 с.
4. Общая органическая химия./ Под ред. Д. Бартона и У.Д. Оллиса. Т.5. Соединения фосфора и серы / Под ред. Н.К. Кочеткова и Э.Е. Пифантьева. – М.: Химия, 1983. – 720 с.
5. Тогилкин А.Ц. Коричная кислота // Большая медицинская энциклопедия. – М., Советская энциклопедия. 1979. Т. 11. Коамид – Криотерапия. – С. 376-377.
6. Машковский М.Д. Лекарственные средства. В 2-х частях. Ч.2. – М.: Медицина, 1998. – 736 с.
7. Красовицкий Б.М., Афанасиади Л.М. Препаративная химия органических люминофоров. – Харьков: Фолио, 1997. – 208 с.
8. Листван В.М., Гончар Г.В., Руденко Е.С. и др. Синтез диарилэтиленов с конденсированными ядрами по реакции Виттига // Журн. орг. химии. – 1981. – Т.17. №13. – С. 1711-1716.
9. Листван В.Н., Листван В.В., Шекель А.Н. Холестерилловые эфиры гетероциклических аналогов коричной кислоты и гетароилоксикоричных кислот. Синтез по реакции Виттига // ХГС. – 2002. – №12. – С. 1678-1681.



**RESEARCH OF GENOPROTECTIVE
EFFECTIVENESS OF EXTRACTS
FROM TEA LEAVES ON THE MUTATIONAL
PROCESS INDUCED BY THE IONIZING
RADIATION AND CHEMICAL
MUTAGENS IN CELLS OF WHEAT
AND BARLEY**

M. Quseynov, Candidate of Biological sciences, Associate Professor
Lankaran State University, Azerbaijan

The genoprotective effectiveness of the extracts of the tea leaf from different stages of technological processing has been studied. The mutations induced in the wheat and oats cell by gamma-rays and dimethyl(a)antrocene. The results of experiments demonstrated the decreasing of the antimutagenic effectiveness of extracts from the late stages of leaf processing.

Conference participant, National championship
in scientific analytics, Open European and Asian
research analytics championship

**ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕНОПРОТЕКТИВНОЙ
ЭФФЕКТИВНОСТИ ЭКСТРАКТОВ ИЗ
ЛИСТЬЕВ ЧАЯ НА МУТАЦИОННЫЙ
ПРОЦЕСС, ИНДУЦИРОВАННЫЙ
ИОНИЗИРУЮЩИМ ОБЛУЧЕНИЕМ
И ХИМИЧЕСКИМИ МУТАГЕНАМИ
В КЛЕТКАХ ПШЕНИЦЫ И ЯЧМЕНЯ**

Гусейнов М.В., канд. биол. наук, доцент
Ленкоранский государственный университет, Азербайджан

Установлена антимутагенная активность экстрактов из листьев чая, полученных с различных стадий их технологической обработки при модификации мутационного процесса индуцированного гамма-лучами, нитрозометилмочевинной и диметилбенз (а) антраценом в клетках ячменя и пшеницы. Эффективность антимутагенного действия экстрактов последовательно снижается на стадиях производственного процесса. Сравнительная оценка их антимутагенной эффективности выявила высокую антимутагенную эффективность экстракта полученного из зелёных листьев чая.

Участник конференции, Национального первенства
по научной аналитике, Открытого Европейско-Азиатского
первенства по научной аналитике

Введение. Накопленные на сегодняшний день данные о роли ингибиторов мутагенеза в антиканцерогенезе свидетельствуют о перспективах практического применения многих ингибиторов мутагенеза, имеющих природное происхождение и действующих с помощью множества и разных не исключаящих друг друга механизмов, включая воздействие, как на внеклеточном, так и на внутриклеточном уровне [1–3]. В частности, результаты исследований в области практических разработок по применению антимутагенов свидетельствуют о снижении уровня ряда заболеваний, в том числе связанных с повреждением генетических структур, а также смертности от онкологических заболеваний [1]. Об этом также свидетельствуют работы по применению практических разработок в области антимутагенеза в пищевой и фармакологической промышленности, геронтологии, профилактической медицине и для терапии осложнений, связанных с производственной и бытовой интоксикацией [1, 2]. Последние годы внимание исследователей направлено на изучение генозащитных свойств композиционных антимутагенов, результаты которых показали, что смеси антимутагенов проявляют более высокую

эффективность действия, чем его отдельные компоненты [1, 3]. Антимутагенным и антиканцерогенным свойствам зелёного чая посвящено большое число экспериментальных исследований. Также, эти исследования свидетельствуют о том, что действие зелёного чая ингибирует рак и подавляет рост опухолевых клеток в различных органах человека и в связи с полученными данными сегодня зелёный чай активно используется в профилактических целях в Японии [4].

Вышеуказанное предопределило проведение цикла исследований по изучению антимутагенных свойств чая с различных стадий его технологической обработки при модификации ими мутагенного действия ионизирующего облучения и химических мутагенов с различным механизмом действия и проведения сравнительной оценки их антимутагенной эффективности.

Материал и методы. В качестве объекта исследования использовали ячмень (*Hordeum vulgare* L.) и пшеницу (*Triticum aestivum*). Анализ аберраций хромосом проводили в анафазе митоза клеток апикальной меристемы первичных корешков ячменя (*Hordeum vulgare* L.) и пшеницы (*Triticum aestivum* L.) [5]. В качестве мутагенов

использовали – гамма-лучи (ГЛ) в дозе 4.8 Гр (телегамма – терапевтическая установка РОКУС-М, ⁶⁰Co, мощность дозы 48р/мин; расстояние – 60 см), химические мутагены – алкилирующий мутаген прямого типа действия нитрозометилмочевина (НММ) в концентрации 0,02%, промутаген – диметилбенз (а) антрацен (ДМБА) фирмы «Serva» – в концентрации 10мкг/мл. В качестве модификаторов мутационного процесса изучены водно – спиртовые экстракты с содержанием сухих веществ 35–37% из листьев чая (0,01мкг/мл) полученные с различных стадий их технологической обработки (ТО), включающей стадии с: зелёных листьев → увядания → скручивания → ферментации → сушки → чёрного чая. Водно – спиртовые экстракты получены в отделе растительных ресурсов Института Ботаники Национальной Академии Наук Азербайджанской Республики.

Полученные данные обработаны общепринятыми методами математической статистики [6]. Фактор антимутагенной эффективности (ФЭА) исследуемых модификаторов рассчитывался по известной формуле [7].

Условия проведения эксперимента.

Свежие сухо – воздушные семена пшеницы и ячменя проращивали в

0,01мкг/мл растворах экстрактов чая в термостате, в чашках Петри при $t = 25^{\circ}\text{C}$. Растворы препаратов готовили на дистиллированной воде, рН воды 5,4. В экспериментах с облучением сухо-воздушные семена пшеницы и ячменя сразу после облучения проращивали в растворах чая. В экспериментах с химическими мутагенами семена в течение 6-ти часов подвергали воздействию путём их замачивания в растворах мутагенов с последующим отмыванием от мутагена под проточной водой в течение 30 минут и дальнейшим проращиванием в растворах экстрактов. Проростки пшеницы и ячменя длиной 10–15 мм фиксировали смесью (фиксатор Карнуа) абсолютного этилового спирта и ледяной уксусной кислоты (3:1) через 45–48 часов от начала замачивания семян. Готовили давлен-

ные ацетокарминовые препараты, на которых проводили анализ aberrаций хромосом (АХ).

Результаты исследований и их обсуждение. Цитогенетические эффекты экстрактов чая с различных стадий ТО изучены при индукции ГЛ частоты aberrаций хромосом в клетках меристемы корешков пшеницы и ячменя, таблица 1.

Из результатов таблицы видно, что экстракты чая полученные со стадий ТО способствуют снижению индуцированной ГЛ частоты aberrаций хромосом с неодинаковой эффективностью. Наиболее высокой антимуtagenной эффективностью отличались экстракты полученные с первых трёх стадий ТО от 54 до 45%, со стадий сушки и до получения чёрного чая антимуtagenная эффективность экстрактов чая характеризуется

значительным снижением, составив 37–29%. Так, если индуцированная ГЛ частота aberrаций хромосом модифицируется экстрактом из зелёных листьев с эффективностью действия до 54%, то ФЭА из чёрного чая снижается до 29%. Однако, необходимо также отметить и то, что изученные экстракты чая не содержат мутагенных продуктов в исходном виде, свидетельством чего является отсутствие их мутагенного действия на спонтанный мутагенез (ранее проведенные исследования) и отсутствие синергизма с генотоксическим действием радиации. В следующей серии экспериментов были изучены цитогенетические эффекты экстрактов чая при модификации ими частоты aberrаций хромосом индуцированных химическим мутагеном – НММ, таблица 2.

Таблица 1.

Влияние экстрактов чая (0,01 мкг/мл), полученного с различных стадий его технологической обработки на частоту aberrаций хромосом в клетках меристемы проростков из облучённых гамма-лучами в дозе 2,9 гр семян пшеницы и ячменя

Вариант опыта	Аберрации хромосом, %	td	P	ФЭА
	$M \pm m$			
Пшеница				
контроль	3,12±0,64	–	–	–
гамма-лучи	9,15±1,02	–	–	–
листья зелёного чая	4,17±0,68	4,0	< 0,001	0,54
увядание	4,59±0,71	3,6	< 0,001	0,50
скручивание	4,99±0,74	3,3	< 0,001	0,45
ферментация	5,72±0,80	2,6	< 0,05	0,37
сушка	6,13±0,82	2,3	< 0,05	0,33
чёрный чай	6,51±0,83	2,00	< 0,05	0,29
Ячмень				
контроль	3,63± 0,64	–	–	–
Гамма-лучи	10,46±1,04	–	–	–
листья зелёного чая	5,00±0,75	4,3	< 0,001	0,52
увядание	5,32±0,76	4,0	< 0,001	0,49
скручивание	5,96±0,80	3,4	< 0,001	0,43
ферментация	6,47±0,84	4,0	< 0,01	0,38
сушка	7,23±0,88	2,3	< 0,05	0,31
чёрный чай	7,55±0,90	2,1	< 0,05	0,28

Таблица 2.

Влияние экстрактов чая (0,01 мкг/мл) полученного с различных стадий его технологической обработки на частоту аббераций хромосом индуцированных НММ (5,5 мМol) в клетках меристемы проростков из семян пшеницы и ячменя

Вариант опыта	Абберации хромосом, %	td	P	ФЭА
	M ± m			
Пшеница				
контроль	1,85±0,82	–	–	–
НММ	9,00±0,98	–	–	–
листья зелёного чая	4,48±0,71	3,7	< 0,001	0,50
увядание	4,73±0,72	3,5	< 0,001	0,47
скручивание	5,16±0,76	3,1	< 0,001	0,43
ферментация	5,49±0,77	2,8	< 0,05	0,39
сушка	5,98±0,80	2,3	< 0,05	0,34
чёрный чай	6,31±0,82	2,1	< 0,05	0,30
Ячмень				
контроль	3,63±0,64	–	–	–
НММ	7,78±0,91	–	–	–
листья зелёного чая	4,05±0,65	3,3	< 0,001	0,48
увядание	4,35±0,70	2,9	< 0,001	0,44
скручивание	4,71±0,72	2,6	< 0,001	0,39
ферментация	4,87±0,73	2,4	< 0,01	0,37
сушка	5,13±0,74	2,2	< 0,05	0,34
чёрный чай	5,41±0,77	1,9	< 0,05	0,30

Как видно из результатов таблицы 2 и в этих экспериментах была выявлена антимуtagenная активность экстрактов чая с различных стадий ТО и их способность ингибировать индуцированную НММ частоту АХ в клетках растений, отличающихся наличием собственной системы метаболической активации. Результаты проведенной серии экспериментов подтвердили наличие тенденции снижения антимуtagenной эффективности экстрактов чая в зависимости от стадий его ТО (зелёных листьев → увядания → скручивания → ферментации → сушки → чёрного чая) до готового продукта. Так, в экспериментах на пшенице, экстракты полученные с первых трёх стадий ТО проявили антимуtagenную эффективность в пределах 50–43%, тогда как видно из таблицы эффективность действия готового чёрного

чая снизилась до 30%. В экспериментах, проведенных на ячмене, также, была выявлена тенденция снижения антимуtagenной эффективности экстрактов чая, полученных с различных стадий ТО, таблица 2. Из результатов этой серии экспериментов видно, что антимуtagenная эффективность экстрактов полученных с первых трёх стадий ТО составила 48-39%, что также значительно ниже этих показателей в экспериментах на пшенице. Одновременно повторяется и тенденция снижения эффективности антимуtagenного действия чая на последующих стадиях ТО до 30%. Таким образом, полученные данные позволяют сделать вывод о способности экстрактов из образцов чая, полученных с различных стадий ТО предотвращать мутационный процесс, связанный с повреждением структуры ДНК. НММ

мутaген прямого действия, действующий без метаболической активации, относится к классу веществ, которые реагируют с ДНК и присоединяют к основаниям углеводородные радикалы [8]. Вышеприведенные данные, позволяют предположить, что одним из механизмов генозащитного действия изученных в работе экстрактов чая, может быть предотвращение мутационного процесса связанного с заменой пар оснований. С целью выявления физиологичности, универсальности и механизма действия антимуtagenного действия исследуемых в работе экстрактов чая, характеризующихся проявлением антимуtagenной активности на всех стадиях ТО, в эксперимент был вовлечён широко распространённый в окружающей среде промутаген ДМБА. В этой серии экспериментов (таблица 3), проведенных

Таблица 3.

Влияние экстрактов чая (0,01 мкг/мл) полученного с различных стадий технологической обработки на частоту aberrаций хромосом индуцированных ДМБА (5,5 мМол) в клетках меристемы проростков из семян пшеницы и ячменя

Вариант опыта	Аберрации хромосом, %	td	P	ФЭА
	M ± m			
Пшеница				
контроль	3,12±0,64	–	–	–
ДМБА	6,36±0,82	–	–	–
листья зелёного чая	3,44±0,62	2,8	< 0,01	0,46
увядание	3,67±0,64	2,6	< 0,01	0,42
скручивание	3,85±0,66	2,3	< 0,05	0,39
ферментация	4,03±0,67	2,2	< 0,05	0,37
сушка	4,23±0,69	1,9	< 0,05	0,33
чёрный чай	4,59±0,72	1,6	< 0,05	0,28
Ячмень				
контроль	3,63±0,64	–	–	–
ДМБА	10,35±1,06	–	–	–
листья зелёного чая	4,44±0,70	4,6	< 0,001	0,57
увядание	4,73±0,72	4,3	< 0,001	0,54
скручивание	5,17±0,75	3,9	< 0,001	0,50
ферментация	6,05±0,81	3,2	< 0,01	0,42
сушка	6,52±0,84	2,8	< 0,01	0,37
чёрный чай	7,03±0,87	2,4	< 0,05	0,32

согласно вышеприведенным схемам, была установлена антимутагенная активность экстрактов чая и по отношению к мутационному процессу, индуцированному ДМБА, эффективность действия которых снижалась, в той же последовательности, что и в вышеприведенных экспериментах – зелёные листья → увядание → скручивание → ферментация → сушка → чёрный чай. Результаты сравнительной оценки антимутагенной эффективности экстрактов чая с различных стадий ТО (Таблицы 1–3) в предотвращении индуцированного физико-химическими факторами мутационного процесса выявили высокую эффективность экстрактов с первых трёх стадий ТО, 65–56%.

Как отмечалось выше, изучению антимутагенной и антиканцерогенной

активности зелёного чая посвящено значительное число экспериментальных работ. Так, антимутагенная активность водного экстракта из зелёного чая (*Camellia sinensis*) показана на культуре клеток китайского хомячка [9]; в системе *Drosophila melanogaster*; также показана антимутагенная и антиканцерогенная активность (водного) экстракта зелёного чая в печени крыс [10]. Полифенолы зелёного чая ингибируют индуцированный N-нитрозобис-(2-оксипропил)-амином карциногенез поджелудочной железы у золотистых сирийских хомячков [9]. Результаты исследования механизма генозащитного действия отдельных метаболитов фенольной или полифенольной природы позволили выдвинуть предположение, что в основе функционирования этих механизмов

лежит адсорбция или инактивация мутагенов прямого и косвенного типа действия [9, 12, 13]; подавление процессов метаболической активации промутагенов [13], а также направленная регуляция активности ферментов пострепликативной [14] и эксцизионной [15; 16] репарации. Также, установлено, что в основе механизма генозащитного действия отдельных метаболитов и ферментов чая лежат механические поглощающие свойства к которым относят катехины, танины. Сравнение экстрактов и полифенолов зелёного и чёрного чая показали, что они имеют практически одинаково полезный эффект для здоровья [10]. Чайный лист содержит сильные антиоксидантные полифенолы, такие как эпигаллокатехин галлат (ЭГКГ) и фермент полифенолоксидазу.

В настоящей работе, в отличие от известных, впервые изучено влияние процесса технологической обработки чая на сохранение его генозащитных свойств и эффективность антимутагенного действия экстрактов с различных стадий его обработки.

Процесс стадий ТО чая от зелёного до чёрного чая способствует снижению его антимутагенной эффективности (АЭ) при модификации ими в дозе 0,01мкг/мл мутационного процесса индуцированного мутагенами в клетках меристемы первичных корешков пшеницы и ячменя в последовательности: зелёный чай > увядание > скручивание > ферментация > сушка > чёрный чай. Антимутагенная эффективность зелёного чая на этапах ТО в клетках меристемы корешков пшеницы и ячменя превысила АЭ чёрного чая при действии ГЛ соответственно на 25 и 24%; НММ на 20 и 18%; ДМБА на 18 и 25%.

Выводы:

1. Изучено влияние процесса технологической обработки чая на сохранение его генозащитных свойств и эффективность антимутагенного действия экстрактов с различных стадий его обработки в клетках пшеницы и ячменя, установлена их антимутагенная активность.

2. Сравнительная оценка антимутагенной эффективности экстрактов чая, полученных с различных стадий его технологической обработки выявила высокую эффективность экстракта из листьев зелёного чая.

3. Антимутагенное действие водно-спиртовых экстрактов чая, с образцов, полученных с различных стадий его технологической обработки установлено в отношении мутагенных факторов, индуцирующих различные типы повреждений ДНК, в том числе: гамма-лучей; нитрозометилмочевины – НММ и диметилбенз (а) антрацена (ДМБА).

4. Антимутагенная активность экстрактов чая носит неспецифический характер, проявляясь вне зависимости от типа действия химических мутагенов и свидетельствует о проявлении их генозащитных свойств на разных этапах формирования и развития мутационных событий.

References:

1. Weisburger J.H. // Lifestyle, health and disease prevention: the underlying mechanisms. – European Journal of Cancer Prevention 2002, Volume 11, (Suppl 2), S1-S7.
2. Alekperov U.K. // Plant antimutagens and their mixtures in inhibition of genotoxic effects of xenobiotics and aging processes. – European Journal of Cancer Prevention 2002, 11 (suppl 2), P. 8-11.
3. Агабейли П.А. // Антиоксиданты и антиоксидантные ферменты в регуляции мутационного процесса. – Баку, Элм, 1989, с. 119.
4. Fujiki H., Suganuma M., Okabe S., Sueoka N., et al. // Cancer inhibition by green tea. – 5th ICMMA. 1996. Okayama, Japan. – P. 7-8.
5. Паушева З.П. Практикум по цитологии растений. – М. Колос. 1980. – С. 1-304.
6. Лакин Г.Ф. // Биометрия. М., Высшая школа, 1990. – с. 1-350.
7. Алекперов У.К. // Антимутагенез. Теоретические и практические аспекты. – М. Наука, 1984. – с. 1-102.
8. Тарасов В.А. // Молекулярные механизмы репарации и мутагенеза. М. «Наука», 1982. – с. 1-228.
9. Mamiko Miyajima and Yukiaki Kuroda. // Antimutagenic action of hot-water extracts of green tea (Camellia sinensis) in cultured Chinese Hamster V79 cells – 5th ICMMA. 1996. Okayama, Japan. – P. 32. p. – 113.

10. Fujie Sh., Fujikawa K. // Detection of delayed antigenotoxicity of green tea extract using a somatic mutation system of Drosophila melanogaster. – 5th ICMMA, December 2-6, 1996 Okayama, Japan. – p-101. P-20.

11. Allan H Conney, Yao-Ping Lu, You-Rong Lou, Mou-Tuan Huang. // Inhibitory effects of tea and caffeine on UV-induced carcinogenesis: relationship to enhanced apoptosis and decreased tissue fat. – European Journal of Cancer Prevention 2002, Volume 11, Suppl. 2, – S. 28-S36.

12. Nagabhusan M. Catechin as an mutagen and anticarcinogen. // Environ. And Mol Mutagens. 1989. Vol.14. Suppl. P.138.

13. Osawa T., Kumon H., Ruce C.A. // Inhibitory effect of lichen constituent on mutagenicity induced by heterocyclic amines. – Environ. and Mol. Mutagenes. 1991. Vol.18, №1. – p. 35-40.

14. Sasaki Y.F. Imanishi H., Ohna T. // Effect of antimutagenic flavourings on SCEs induced by chemical mutagens. Mutat. Res. Genet. Toxicol. Test. 1987. Vol. 189. №3. – P. 313-318.

15. Hara Y. // Green tea. Marcel Dekker, New York, 2001 p. 252.

16. М.В.Гусейнов Генетическая активность биологически активных веществ представителей флоры тальша. Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyası Botanika institunun elmi əsərləri. TOM XXVII Bakı-2007



International Academy
of Science and Higher Education

INTERACTION OF CLEAVAGE CRACKS WITH SLIPBANDS IN ALKALI-HALIDE CRYSTALS

V. Fedorov¹, Doctor of Mathematical and Physical sciences, Full Professor
 L. Kariev², Candidate of Mathematical and Physical sciences, Associate Professor
 V. Novikov³, student
 Tambov State University named after G.R. Derzhavin, Russia¹
 Tyumen State University, Russia^{2,3}

Показано, что при пересечении трещиной скола границы искусственно введенной и затем состаренной полосы скольжения по {110}, в кристаллах LiF, скорость распространения трещины изменяется в сравнении с той же величиной при пересечении ею свежей полосы скольжения. Отличается, так же, рельеф поверхности скола в первом и втором случаях. Установлены причины изменения скорости трещины и различия рельефа поверхности скола.

Ключевые слова: полоса скольжения, трещина скола, скорость распространения, краевые дислокации, примесные и точечные дефекты, концентрации.

Conference participants, National championship in scientific analytics, Open European and Asian research analytics championship

Дефекты типа двойников, границ зерен, инородных включений, полос Бриллиантова-Обреимова, полос сброса, межблочных границ и так далее, являются источниками внутренних напряжений в материале, что влияет на распространение трещин [1]. При этом разрушение способно ускоряться, замедляться или останавливаться вовсе в зависимости от характера и величины упругих напряжений, а также от протяженности областей их локализации.

Таким образом, трещина обладает высокой чувствительностью ко всякого рода дефектам материала, которые в свою очередь, во многом определяют его механические свойства. Следовательно трещину можно использовать в качестве инструмента, а один из ее параметров – скорость распространения, в качестве критерия для оценки изменения механических свойств материала в локализованных областях.

Работа посвящена сравнению качественной оценки механических свойств макрообластей кристалла с искусственно введенными полосами скольжения по {110} (свежей и состаренной) со свойствами недеформированных зон [2] методом фиксирования разрушения кристалла по плоскости спайности.

Для исследований использовали монокристаллы LiF с концентрацией

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТРЕЩИН СКОЛА С ПОЛОСАМИ СКОЛЬЖЕНИЯ В ШЕЛОЧНОГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Фёдоров В.А.¹, доктор физ.-мат. наук, профессор
 Карьев Л.Г.², канд. физ.-мат. наук, доцент
 Новиков В.П.³, студент
 Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, Россия¹
 Тюменский государственный нефтегазовый университет, Россия^{2,3}

Показано, что при пересечении трещиной скола границы искусственно введенной и затем состаренной полосы скольжения по {110}, в кристаллах LiF, скорость распространения трещины изменяется в сравнении с той же величиной при пересечении ею свежей полосы скольжения. Отличается, так же, рельеф поверхности скола в первом и втором случаях. Установлены причины изменения скорости трещины и различия рельефа поверхности скола.

Ключевые слова: полоса скольжения, трещина скола, скорость распространения, краевые дислокации, примесные и точечные дефекты, концентрации.

Участники конференции, Национального первенства по научной аналитике, Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

примесей 10^{-3} вес. %. Из крупных блоков выкалывали образцы размерами $16 \times 5 \times 3$ мм. В кристалл вводили полосы свежих краевых [3] дислокаций ($\rho \sim 2 \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$). Свежие дислокации состаривали при $T = 373 \text{ K}$ в течение 48 часов [4]. Охлаждали образцы на воздухе. Дислокационную структуру выявляли методом химического травления. В экспериментах использовали установку СФР-1М и методику, описанную в [1].

При работе установки в режиме лупы времени были получены кинокадры, иллюстрирующие изменение полей напряжений в кристалле при прохождении трещиной полосы скольжения (рис. 1). Видно, что взаимодействие полей напряжений трещины и полосы скольжения в случае свежей и состаренной полос скольжения начиналось до того, как трещина пересекла полосу скольжения, отчетливо прослеживается аннигиляция

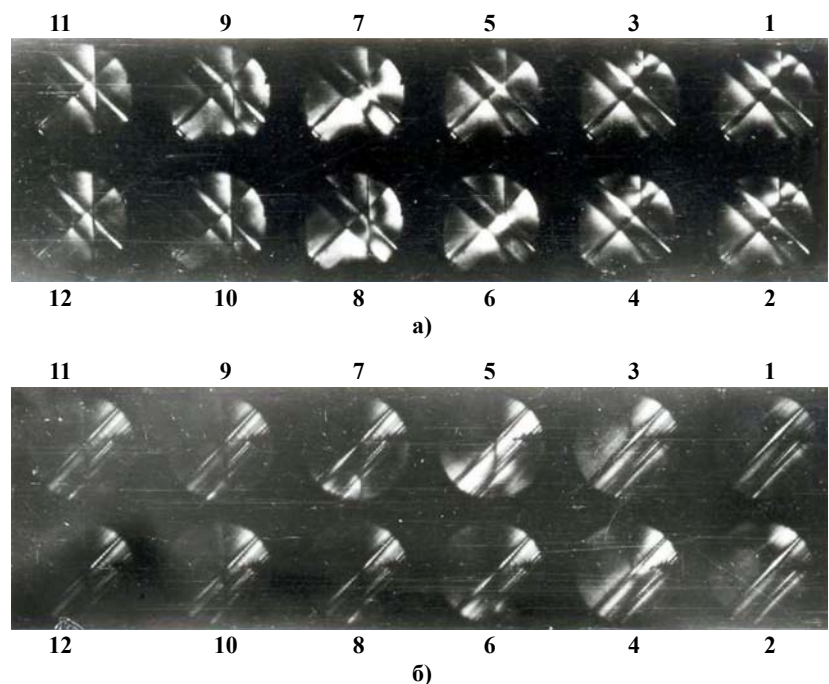


Рис. 1. Взаимодействие трещины скола с несостаренной (а) и состаренной (б) полосой скольжения по {110}, LiF (10^{-3} вес. %)

сжимающих напряжений на границе полос скольжения.

Однако, анализ регистрограмм процесса разрушения показывает, что свежая полоса скольжения в большей степени влияет на скорость трещины, чем состаренная (рис. 2). Например, при плотности дислокаций в полосах скольжения $\sim 10^7 \text{ см}^{-2}$ изменение скорости трещины в области аккомодации свежей полосы скольжения превысило в 5 раз изменение скорости в той же области в состаренной полосе скольжения. Вне зон аккомодации скорость трещины была в обоих случаях одинаковой и соответствовала скорости начала процесса разрушения.

В обоих случаях проведены фрактрографические исследования поверх-

ности скола. На сколе, пересекающем свежую полосу скольжения, наблюдали многочисленные ступеньки. При пересечении трещиной состаренной полосы скольжения изменение рельефа в большинстве случаев незначительное (рис. 3).

В некоторых опытах со свежей полосой скольжения движущаяся трещина переходила из плоскости спайности в плоскость полосы скольжения $\{110\}$, чего не наблюдалось в экспериментах с состаренной полосой скольжения, при прочих равных условиях. Переход трещины в плоскость скольжения имеет место лишь при одновременной эволюции полосы сдвига.

Описанные различия можно объяснить тем, что примеси и точечные

дефекты, концентрируясь в процессе состаривания в области полосы скольжения (особенно в области ее границ) косвенно воздействуют на трещину, понижая уровень напряжений за счет образования на дислокациях примесных атмосфер. Выступая, также, в роли стопоров дислокаций, они способны облегчить движение трещины в кристалле сквозь полосу.

Таким образом, макрообласть кристалла, являющаяся локализованным множеством краевых дислокаций, обремененных примесными и точечными дефектами, проявляет иные механические свойства в случае взаимодействия с ней развивающейся трещины скола, по сравнению с механическими свойствами областей кристалла со свежими краевыми дислокациями, или свободными от дислокаций участками, то есть областей с локально меньшей концентрацией примесей и точечных дефектов. Это выражается в изменении скорости трещины скола при пересечении ею границы искусственно введенной и затем состаренной полосы скольжения по $\{110\}$ в сравнении с той же величиной при пересечении трещиной свежей полосы скольжения (при прочих равных условиях) и различии рельефа поверхности скола, прошедшего через искусственно введенную, свежую и состаренную, полосу скольжения краевых дислокаций.

References:

1. Финкель В.М. Физические основы торможения разрушения. – М.: Металлургия, 1977. – 360 с.
2. Федоров В.А., Карьев Л.Г., Макаров А.В., Каширин А.Н., Николюкин А.М. Влияние состояния примесей и их концентраций на физические и механические свойства LiF // Актуальные проблемы прочности: Тез. докл. I Международной конф. 26-30 сентября 1994 года. – Новгород. – 1994. – С. 51.
3. Смирнов Б.И. Дислокационная структура и упрочнение кристаллов. – Л.: Наука, 1981. – 235 с.
4. Джонстон В., Гилман Дж. Скорость передвижения, плотность дислокаций и пластическая деформация кристаллов фтористого лития // Успехи физических наук. – 1960. – Т. LXX. – Вып. 3. – С. 489-514.

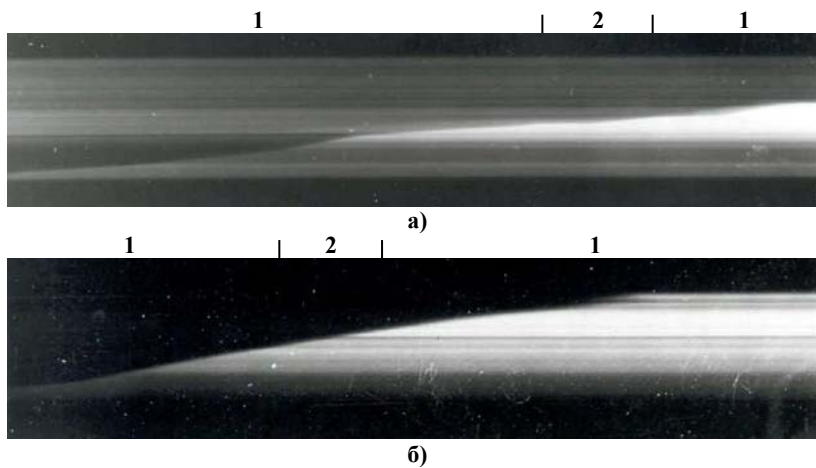


Рис. 2. Непрерывная развертка процесса взаимодействия трещины с полосой скольжения ($\rho \sim 3 \cdot 10^7 \text{ см}^{-2}$): а – свежей, б – состаренной. 1 – недеформированный участок кристалла, 2 – деформированный участок кристалла

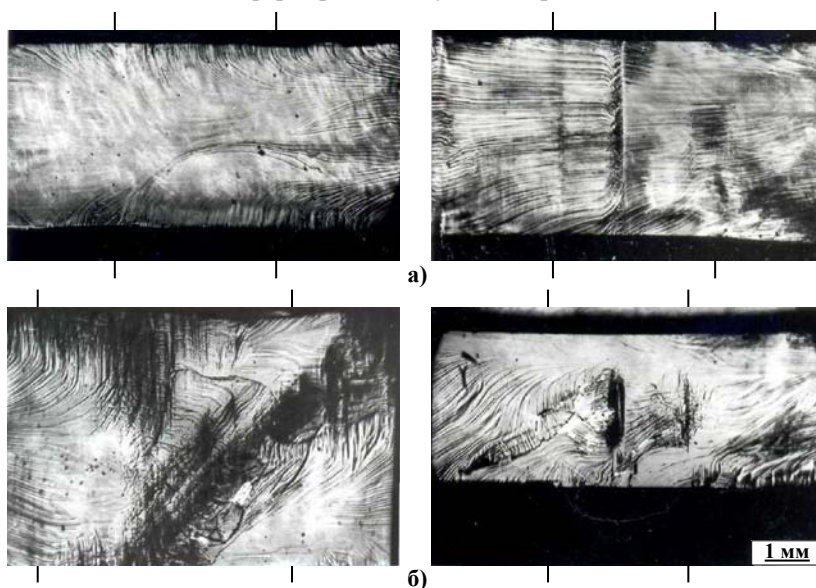


Рис. 3. Поверхности скола LiF (10^{-3} вес. %), пересекавшего предварительно введенные в кристалл полосы скольжения по $\{110\}$; а – состаренные, б – свежие. Штрихами отмечены границы полосы скольжения

EXPERIMENTAL DETERMINATION OF THE DEPENDENCE OF SPEED OF THE DYE MASS-TRANSFER IN THE FLAT HORIZONTAL LAYER OF LIQUID ON THE LAYER THICKNESS AT VARIOUS BOUNDARY CONDITIONS

Ya. Krasnoperov, postgraduate student
M. Sklyarenko, Candidate of Technical sciences, Senior Lecturer
Perm State National Research University, Russia

In our previous article we discovered convection in thin horizontal flat water layer when we put a drop of dye water solution. We measured dye's mass-transfer speed and found out that effective diffusivity is decreased proportionally to layer thickness. Convective mass-transfer is almost eliminated in 0,5 mm layer.

Keywords: diffusion, convection, optical methods, identification, mass-transfer.

Conference participants, National championship in scientific analytics, Open European and Asian research analytics championship

Введение. Исследования процессов массопереноса в различных средах играют важную роль для оптимизации технологии химического производства, в пищевой, текстильной промышленности, в медицине. Появление цифровых фотокамер с высоким разрешением предоставило возможность получения точных данных о концентрации диффузанта в каждой точке (поле концентрации) по яркости окрашенного раствора.

В статье авторов [1] описывается исследование процесса диффузии окрашенных веществ в плоском горизонтальном слое жидкости в открытой ячейке толщиной 1.6 мм. В результате экспериментов оказалось, что эффективный коэффициент диффузии более чем на порядок превосходит значение коэффициента молекулярной диффузии. Была выдвинута гипотеза о том, что это отклонение вызвано наличием конвективных потоков. Наличие конвекции качественно подтвердилось путем добавления в жидкость алюминиевой пудры, которая визуализировала макроскопическое движение. Также путем анализа динамики собственных мод задачи в рамках линейной модели [1] было выявлено наличие колебательных мод, скорее всего, соответствующих конвективному массопереносу.

Силу конвекции можно уменьшить посредством использования закрытой ячейки, позволяющей устранить возможные поверхностные механизмы генерации конвективных потоков и увеличить диссипацию конвективных потоков за счет дополнительной поверхности. Конвекцию можно также ослабить путём уменьшения толщины слоя жидкости.

Целью данной работы является экспериментальное исследование зависимости скорости массопереноса красителя в плоском горизонтальном слое жидкости, находящейся при различных граничных условиях от толщины слоя методом цифровой фотосъемки.

Описание установки. Для экспериментов были изготовлены 5 закрытых ячеек. Горизонтальный размер ячеек составлял 5x5 см². Ячейки (см. рис.1) были изготовлены из трех частей: стеклянного основания, рамы и стеклянной крышки, склеенных между собой цианоакрилатным клеем («суперклей»). Ячейки отличались толщиной рамы, изготовленной из нескольких слоев самоклеящейся полиэстеровой пленки толщиной 100 мкм. Таким образом, можно было изменять высоту слоя жидкости, которая составляла в закрытых ячейках 0,5, 0,7, 1, 1,4 и 2 мм. В стеклянной крышке каждой ячейки были просверлены 5 отверстий диаметром 2 мм: 4 по краям и одно в центре. Такая конструкция позволила избежать неполного заполнения ячейки жидкостью вследствие возникновения капиллярных эффектов, препятствующих вытеснению воздуха.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАВИСИМОСТИ СКОРОСТИ МАССОПЕРЕНОСА КРАСИТЕЛЯ В ПЛОСКОМ ГОРИЗОНТАЛЬНОМ СЛОЕ ЖИДКОСТИ ОТ ТОЛЩИНЫ СЛОЯ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЯХ

Красноперов Я.И., аспирант
Скляренко М.С., канд. техн. наук, старший преподаватель
Пермский государственный национальный исследовательский университет, Россия

Как показано в нашей предыдущей нашей работе при помещении капли водного раствора красителя в горизонтальный плоский слой воды наблюдается конвекция. В работе приведены результаты исследования зависимости скорости массопереноса от толщины слоя. Обнаружено, что эффективный коэффициент диффузии убывает пропорционально уменьшению толщины слоя. При толщине менее 0,5 мм конвективные эффекты практически отсутствуют.

Ключевые слова: диффузия, конвекция, оптические методы, идентификация, массоперенос.

Участники конференции, Национального первенства по научной аналитике, Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

Установка для наблюдения поля концентрации (см. рис. 2) состояла из штатива 2, установленного на лабораторном столе 1, на котором последовательно закреплялись источник света 6, полупрозрачный светорассеивающий экран 3, ячейка 4 и цифровой фотоаппарат 5. Источником света служил сверхъяркий белый светодиод ЗНPD-3 со световым потоком 150 лм, а экраном – 2 листа молочного светорассеивающего стекла толщиной 3 мм каждое.

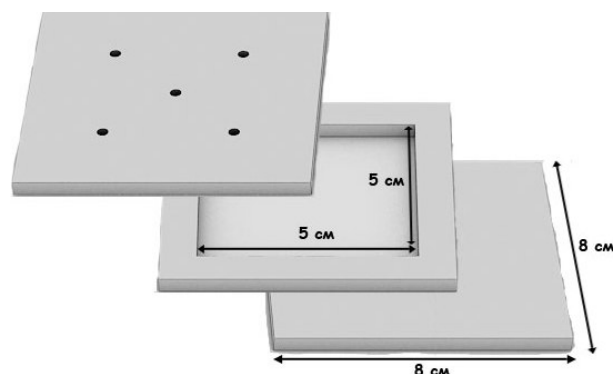


Рис. 1. Ячейка для измерений

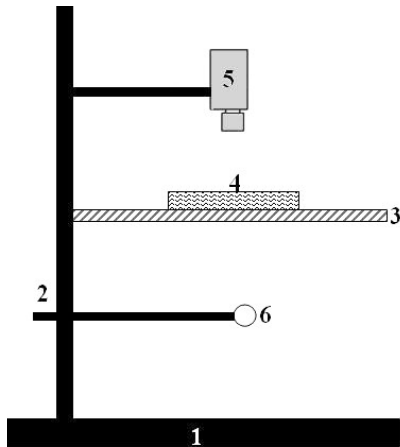


Рис. 2. Установка для измерения поля концентрации

Методика измерения концентрации. Для измерения поля концентрации в плоском слое жидкости в качестве диффузанта используются вещества, дающие цветной раствор. Например, это могут быть анилиновые или другие водорастворимые красители. Чтобы использовать метод цифровой фотосъемки для измерений поля концентрации, необходимо связать яркость изображения с его концентрацией, то есть получить градуировочную кривую.

Для получения одной точки градуировочной кривой в ячейку, установленную на белом или сером фоне, помещают тонкий слой (0.5–2.5 мм) раствора известной концентрации и осуществляют фотографирование ячейки. При этом толщина слоя должна быть одинаковой как при градуировке, так и при дальнейшем измерении концентрации в основном эксперименте. Для уменьшения уровня шумов на изображении для его обработки применяются различные фильтры, например, фильтр Гаусса [2]. По изображению определяется средняя по пикселям яркость раствора. Яркость пикселя B можно определять как:

$$B = \frac{1}{3} \sum_{k=1}^3 I_k,$$

где I_k – интенсивности компонент в пространстве RGB, или $B = V$, где V – значение яркости в пространстве HSV[2]. Для исключения зависимости от яркости осветителя (осветителей) вводится относительная яркость $\delta B = B_d/\bar{B}_b$, B_d – яркость раствора, \bar{B}_b – средняя яркость фона. Под фоном понимается эталонный объект (например, лист белой бумаги), расположенный на том же кадре, что и ячейка. В дальнейшем будем оперировать именно относительной яркостью δB .

На рис. 3 показаны зависимости относительной яркости раствора от концентрации для различных ячеек, полученные вышеизложенным методом. В качестве красителя использовался алый тканевый краситель (ТУ 2389-010-44297874-2000), в качестве растворителя – дистиллированная вода.

Для ячеек (рис. 3) толщиной 0.5, 0.7, 1, 1.4, 2 мм были использованы следующие аппроксимирующие кривые соответственно:

$$c(\delta B) = -0,283 \ln(0,407 \cdot \delta B)\%,$$

$$c(\delta B) = -0,101 \ln(0,972 \cdot \delta B)\%,$$

$$c(\delta B) = -0,179 \ln(0,429 \cdot \delta B)\%,$$

$$c(\delta B) = -0,068 \ln(1,05 \cdot \delta B)\%,$$

$$c(\delta B) = -0,116 \ln(0,443 \cdot \delta B)\%.$$

Кривые для 0.7 мм и 1.4 мм расположены в области более низких диапазонов яркости, т.к. при фотографировании данных ячеек помещался другой фоновый объект, относительно которого измерялась яркость раствора.

Определение скорости массопереноса. Для измерения скорости массопереноса капли красителя в плоском слое воды в центр ячейки помещались равные по площади капли 0,1% раствора алого тканевого красителя и в течение 30–60 мин. фотографировался процесс роста диффузионного пятна.

Для количественной оценки скорости массопереноса отслеживалась эволюция размеров диффузионного пятна. В качестве характерного размера использовался средний радиус \bar{r} , определяемый путем усреднения по площади кадра с весами, равными значению концентрации в заданных точках:

$$\bar{r} = \frac{\sum_i \sum_j c_{i,j} \cdot r_{i,j}}{\sum_i \sum_j c_{i,j}}, \quad (1)$$

где $i = 1, 2, \dots, N$, N – размер ячейки в пикселях изображения, $c_{i,j}$ – массовая концентрация в точке (i,j) , $r_{i,j}$ – расстояние от центра пятна до точки (i,j) .

В реальных экспериментах очень сложно создать точечные начальные условия. При введении капли она неизбежно размывается, будем аппроксимировать ее Гауссовым пятном. При этом поле концентрации будет решением следующей граничной задачи:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \Delta c, \quad c(r, t = 0) = c_0 e^{-\frac{r^2}{r_0^2}}, \quad c(r \rightarrow \infty, t) = 0,$$

где r_0 , c_0 – начальный средний радиус пятна и концентрация красителя в центре пятна. В работе [3] показано, что в данном случае

$$\bar{r}^2 - r_0^2 = \pi D t. \quad (2)$$

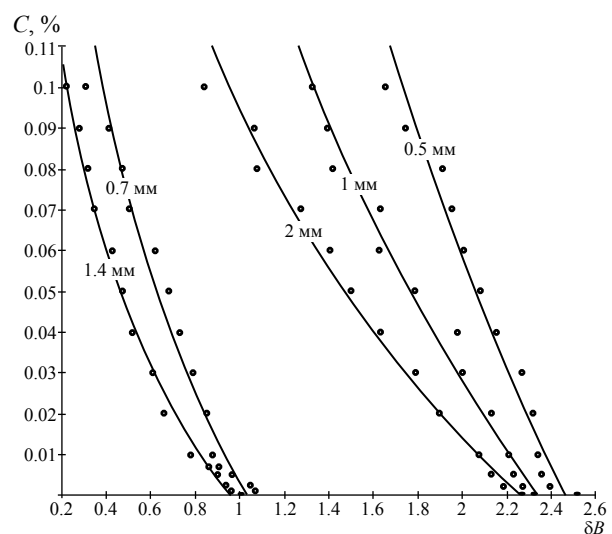


Рис. 3. Зависимость концентрации от относительной яркости раствора

Путем сравнения экспериментальной зависимости разницы квадратов среднего радиуса и начального среднего радиуса с линейной теоретической зависимостью (2) можно по сходимости/расходимости кривых судить о наличии недиффузионных эффектов, а также оценить эффективный коэффициент диффузии, который будет описывать скорость массопереноса.

Зависимость эффективного коэффициента диффузии от толщины. В работе [1] было доказано наличие конвективных эффектов при массопереносе капли красителя в плоской открытой ячейке. Наличие верхней крышки ячейки и уменьшение толщины слоя должно неизбежно привести к более быстрому затуханию конвективных потоков. Верхняя граница также приводит к блокировке механизма генерации конвекции Марангони [4] ввиду отсутствия у жидкости свободной поверхности. Поэтому основным механизмом генерации конвекции останется концентрационная конвекция, вызванная силой плавучести, возникающей в поле тяжести вследствие неоднородности концентрации по вертикали.

В экспериментах будем измерять скорость массопереноса в зависимости от толщины слоя. Однако на скорость массопереноса влияет не только толщина ячейки, но и вязкость жидкости, коэффициент диффузии и т.д. Поэтому удобнее будет оперировать безразмерным параметром. Можно провести прямую аналогию между тепловой конвекцией в плоском слое, которая вызывается вертикальным градиентом температуры и концентрационной конвекцией. По аналогии с коэффициентом теплового расширения [5] можно ввести коэффициент концентрационного сжатия

$$\beta = \frac{\partial \rho}{\partial c} \cdot \frac{1}{\rho}.$$

Пикнометрическим методом была получена зависимость плотности от концентрации и по ней определено значение

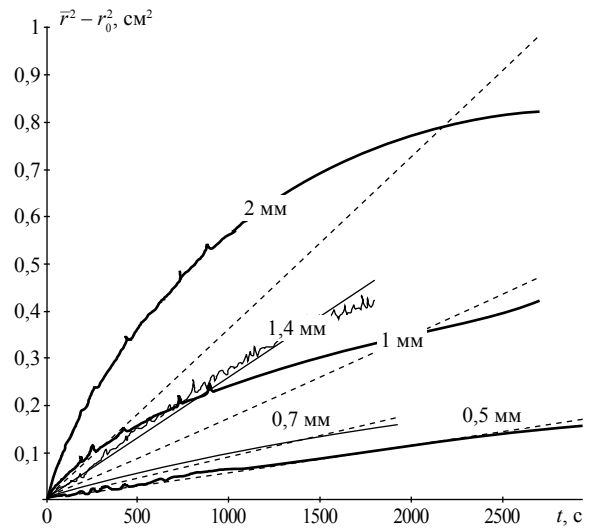
$$\beta = 0,039 \frac{1}{\%}.$$

Концентрационная конвекция характеризуется диффузионным аналогом числа Рэлея [5]

$$R_D = \frac{g \cdot \beta \cdot \Delta c \cdot h^3}{\nu D},$$

где g – ускорение свободного падения, ν – кинематическая вязкость жидкости (в нашем случае воды), Δc – характерный перепад концентраций, h – толщина плоского слоя жидкости. Здесь мы пренебрегаем зависимостью вязкости раствора от концентрации красителя, поскольку использованный нами краситель не является ПАВ и были использованы малые (менее 0,1%) концентрации раствора. В отличие от стационарной тепловой конвекции, которая поддерживается за счет внешних источников тепла, конвекция в нашей ячейке будет иметь диссипативный характер, т.к. вертикальный градиент концентрации не будет постоянным ввиду отсутствия постоянных источников концентрации, поэтому использование числа Рэлея несколько условно. При числе Рэлея, меньшем некоторого критического значения, в ячейке не будет возникать конвекция. Нами

был исследован массоперенос капли красителя в закрытых ячейках толщиной 2,0, 1,4, 1,0, 0,7, 0,5 мм, начальная концентрация капли составляла 0,1%. На рис. 4 представлены зависимости $\bar{r}^2 - r_0^2$ от времени.



Данные экспериментальные кривые были аппроксимированы зависимостью (2) с помощью метода наименьших квадратов. В ходе аппроксимации были определены эффективные коэффициенты диффузии. Как видим, с течением времени все зависимости стремятся к линейной (см. формулу (2)), характерной для молекулярной диффузии, так как конвекция в ячейке носит затухающий характер ввиду отсутствия источников, поддерживающих перепад концентрации.

Как видно из рис. 5. эффективный коэффициент диффузии убывает пропорционально кубическому корню числа Рэлея (точность линейной аппроксимации экспериментальных результатов составляет 5%). Отметим, что бесконечного роста эффективного коэффициента диффузии на практике не будет, так как при увеличении толщины слоя не будет справедлива двумерная модель, использованная для описания процесса.

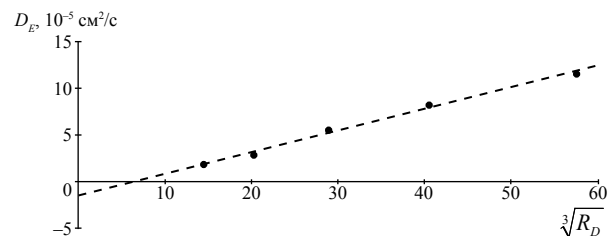



Рис. 5. Зависимость эффективного коэффициента диффузии от кубического корня из числа Рэлея

Заключение. Из графиков и таблицы видно, что с уменьшением диффузионного числа Рэлея скорость массопереноса капли раствора красителя в плоском слое жидкости падает. При числе Рэлея, меньшем 3000, конвективные эффекты практически отсутствуют, что подтверждается линейностью зависимости квадрата среднего радиуса от времени. Дальнейшее уменьшение числа Рэлея приведет к полной блокировке конвекции.

References:

1. Марценюк М.А. Анализ процесса диффузии окрашенных веществ в плоском слое жидкости по данным цифровой фотосъемки [Текст] / М.А. Марценюк, М.С. Скляренко // Научн.-техн. Ведомости СПбГПУ. – 2010. – Вып.105. – С. 125–133.
2. Шапиро Л. Компьютерное зрение [Текст] / Л. Шапиро, Дж. Стокман. – М.: Бинوم. Лаборатория знаний, 2006. – 752 с.
3. Красноперов Я.И. Исследование зависимости скорости массопереноса красителя в плоском слое жидкости от толщины слоя методом цифровой фотосъемки [Текст] /

- Я.И. Красноперов, М.С. Скляренко // Вестн. Перм. ун-та. – 2011. – Вып. 10(15). Информационные системы и технологии. – С. 29–34.
4. Зуев А.Л. Особенности концентрационно-капиллярной конвекции [Текст] / А.Л. Зуев, К.Г. Костарев // УФН. 178:10. – 2008. – С. 1065–1085.
5. Ландау Л.Д. Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т.6. Гидродинамика [Текст] / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 736 с.
6. Скляренко М.С. Методы компьютерного видения в физическом эксперименте [Текст] / М.С. Скляренко // Вестн. Перм. ун-та. – 2007. – Вып. 10(15). Информационные системы и технологии. – С.85–93.



INTERNATIONAL SCIENTIFIC CONGRESS

*Multisectoral scientific-analytical forum
for professional scientists and practitioners*

Main goals of the IASHE scientific Congresses:

- **Promotion of development of international scientific communications and cooperation of scientists of different countries**
- **Promotion of scientific progress through the discussion comprehension and collateral overcoming of urgent problems of modern science by scientists of different countries**
- **Active distribution of the advanced ideas in various fields of science**

For additional information please contact us:
www: <http://gisap.eu>, e-mail: congress@gisap.eu



MORERA-TYPE THEOREM IN THE UNIT CIRCLE

V. Silenko, Candidate of Mathematical and Physical sciences,
senior lecturer

Donetsk National University of Economics and Trade named
after M. Tugan-Baranovsky, Ukraine

New generalizations of the Morera function holomorphy theorem have been obtained. The precise conditions of growth of $f \in C(\mathbf{H}^2)$ under which the boundary of some hyperbolic rectangle, or the boundary of some hyperbolic four-sided set have the Morera property for the group NA of the translations of the hyperbolic plane \mathbf{H}^2 have been determined. The cases of two hyperbolic rectangles and two hyperbolic four-sided sets have also been established.

Keywords: Pompeiu problem, Pompeiu set, hyperbolic plane, hyperbolic rectangle, hyperbolic four-sided set, Morera type theorem, holomorphy function.

Conference participant, National championship
in scientific analytics, Open European and Asian
research analytics championship

Классическая теорема Мореры характеризует голоморфные функции одной комплексной переменной в терминах интегральных условий. Рассмотрим проблему Мореры на вещественной гиперболической плоскости \mathbf{H}^2 , реализованной в единичном круге $D = \{z \in \mathbf{C}: |z| < 1\}$, где \mathbf{C} – комплексная плоскость. В модели Пуанкаре гиперболической плоскости \mathbf{H}^2 единичный круг D трактуется как плоскость Лобачевского с неевклидовым расстоянием:

$$d(z_1, z_2) = \frac{1}{2} \ln \frac{|1 - \bar{z}_1 z_2| + |z_2 - z_1|}{|1 - \bar{z}_1 z_2| - |z_2 - z_1|}$$

между точками $z_1, z_2 \in D$ и мерой:

$$d\omega = \frac{dx dy}{(1 - |z|^2)^2} (z = x + iy).$$

Расстояние d и мера $d\omega$ являются инвариантными относительно группы дробно-линейных автоморфизмов круга D .

Группа $G = SU(1,1)$ конформных автоморфизмов круга D состоит из комплексных матриц

$$g = \begin{pmatrix} a & b \\ \bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix},$$

$|a|^2 - |b|^2 = 1$ и действует транзитивно на D посредством отображений ($z \in D$).

$$g \circ z = \frac{az + b}{bz + a} (z \in D).$$

Разложение Ивасава группы G имеет вид $G = KAN$, где $K = SO(2)$ – группа вращений \mathbf{C} ,

$$A = \left\{ a_t = \begin{pmatrix} cht & sht \\ sht & cht \end{pmatrix} : t \in \mathbf{R} \right\},$$

$$N = \left\{ n_s = \begin{pmatrix} 1+is & -is \\ is & 1-is \end{pmatrix} : s \in \mathbf{R} \right\}$$

ТЕОРЕМЫ ТИПА МОРЕРЫ В ЕДИНИЧНОМ КРУГЕ

Силенко В.Е., канд. физ.-мат. наук
Донецкий национальный университет экономики и торговли
им. М. Туган-Барановского, Украина

Получены новые обобщения теоремы Мореры о голоморфности функции. Для группы “сдвигов” NA гиперболической плоскости \mathbf{H}^2 определены точные условия на рост функций $f \in C(\mathbf{H}^2)$, для которых граница гиперболического прямоугольника или граница гиперболического четырехсторонника являются множествами Мореры. Также рассмотрены случаи двух гиперболических прямоугольников и двух гиперболических четырехсторонников. Найдены примеры функций с нулевыми интегралами по границам гиперболических четырехсторонников, подтверждающие точность полученных условий.

Ключевые слова: проблема Помпейю, множество Помпейю, гиперболическая плоскость, гиперболический прямоугольник, гиперболический четырехсторонник, теорема Мореры, голоморфность функции.

Участник конференции, Национального первенства
по научной аналитике, Открытого Европейско-Азиатского
первенства по научной аналитике

(см., например, [1, с. 92]). Подгруппа NA , действующая транзитивно на D , состоит из матриц

$$\begin{pmatrix} ch t + ise^{-t} & ch t - ise^{-t} \\ sh t + ise^{-t} & sh t - ise^{-t} \end{pmatrix},$$

где $s, t \in \mathbf{R}$.

Гиперболические прямые представляют собой дуги окружностей (и диаметры) в D , ортогональные единичной окружности ∂D , орициклы – евклидовы окружности в D , касающиеся ∂D . Эквидистанты – дуги евклидовых окружностей, пересекающих ∂D . Пусть $s_0, t_0 \in \mathbf{R}$, $\varphi \in (-\pi, \pi]$, $\alpha, \beta \in \mathbf{R}_+$, где $\mathbf{R}_+ = \{x \in \mathbf{R}: x > 0\}$. Будем называть гиперболическими прямоугольниками множества

$$\{z = e^{i\varphi} \cdot n_s a_t \circ 0 : s_0 \leq s \leq s_0 + \alpha, t_0 \leq t \leq t_0 + \beta\},$$

а гиперболическими четырехсторонниками – множества

$$\{z = e^{i\varphi} \cdot n_s a_t \circ 0 : s_0 \leq s \leq s_0 + \alpha e^{2t}, t_0 \leq t \leq t_0 + \beta\}$$

и обозначим

$$Q_\alpha = \{z = n_s a_t \circ 0 : 0 \leq s \leq \alpha, 0 \leq t \leq 1\},$$

$$K_\alpha = \{z = a_t n_s \circ 0 : 0 \leq s \leq 1, 0 \leq t \leq \alpha\} = \\ = \{z = n_s a_t \circ 0 : 0 \leq s \leq e^{2t}, 0 \leq t \leq \alpha\}.$$

Нетрудно видеть, что гиперболический прямоугольник Q_α представляет собой часть круга D , размещенную между двумя орициклами с общей точкой $z_0 = 1$, и двумя гиперболическими прямыми, входящими в эту точку. Гиперболический четырехсторонник K_α ограничен двумя орициклами с общей точкой $z_0 = 1$, а также гиперболической прямой и эквидистантой, входящими в эту точку.

Рассмотрим следующую задачу. Пусть $f \in C(D)$ и для некоторой кусочно-гладкой замкнутой кривой $\gamma \in D$

$$\int_{\gamma} f(z) dz = 0 \text{ для всех } g \in G. \quad (1)$$

Следует ли отсюда, что f голоморфна в D ? В общем случае ответ отрицательный (см., например, [2]), но при некоторых дополнительных предположениях голоморфность f имеет место.

Для общих кривых наиболее известен следующий результат, полученный К.А. Беренштейном и М. Шахшехани в [3]. Пусть $P \subset D$ – область Липшица-Жордана, граница которой $\gamma = \partial P$ не является вещественно-аналитической кривой. Тогда если функция $f \in C(D)$ удовлетворяет (1), то она голоморфна в D .

Из результата К.А. Беренштейна и М. Шахшехани таким образом следует, что для любого $\alpha \in \mathbf{R}_+$ граница гиперболического прямоугольника ∂Q_α , как и граница гиперболического четырехсторонника ∂K_α обладают свойством Мореры.

Однако, если вместо всей группы движений G рассматривать только подгруппу “сдвигов” NA , ситуация меняется. Так, если $f \in C(D)$ и для некоторого $\alpha \in \mathbf{R}_+$

$$\int_{\partial(gQ_\alpha)} f(z) dz = 0$$

для всех $g \in NA$, то отсюда в общем случае не следует, что f голоморфна в D . В связи с этим возникают обобщения проблемы Мореры в двух направлениях: исследование нескольких множеств (например, двух гиперболических прямоугольников) и установление дополнительных ограничений на рассматриваемые функции.

Одним из таких ограничений является условие $f \in L^2(D)$, полученное М.Л. Аграновским в [4, теорема 1]. Это условие, являясь весьма общим, неточно для некоторых конкретных контуров. Например, в случае, когда γ – окружность, наилучшие условия получены В.В. Волчковым в [2, теорема 1].

В следующих двух теоремах рассмотрены функции с нулевыми интегралами по границам гиперболических прямоугольников и четырехсторонников и найдены точные условия, обеспечивающие голоморфность таких функций.

С помощью сведения к проблеме Помпейю показано, что условие $f \in L^2(D)$, накладывающее ограничения на поведение функции вблизи всей границы круга D , можно заменить ограничениями на рост функции лишь в окрестности $z_0 = 1$.

По поводу других результатов, связанных с теоремой Мореры, см. [5] – [10] и обширную библиографию к этим работам.

Для $z \in D$ обозначим $m(z) = 1 - |z|^2$,

$$M_f(z) = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 (f \cdot m)(n_u a_v \circ z) |dudv$$

и положим

$$\lambda_l(z) = \frac{e^{2l}(1-|z|^2) - (1+|z|^2-2z)}{e^{2l}(1-|z|^2) + (1+|z|^2-2\bar{z})} \quad (l \in \mathbf{N}),$$

$$\eta_l(z) = \frac{l(1-|z|^2) + iz(1-\bar{z})}{l(1-|z|^2) + i(1-\bar{z})} \quad (l \in \mathbf{Z}).$$

Теорема 1. 1) Пусть $f \in C(D)$,

$$\forall z \in D \quad M_f(\lambda_l(z)) = o(1) \text{ при } l \rightarrow +\infty, \quad l \in \mathbf{N}, \quad (2)$$

и для некоторых $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbf{R}_+$

$$\int_{\partial(gQ_{\alpha_1})} f(z) dz = \int_{\partial(gQ_{\alpha_2})} f(z) dz = 0 \text{ для всех } g \in NA. \quad (3)$$

Тогда если $\alpha_1/\alpha_2 \notin \mathbf{Q}$, или

$$M_f(z) = o(1) \text{ при } z \rightarrow 1 \text{ по орициклам}, \quad (4)$$

то $f(z)$ голоморфна в D .

2) Для любых $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbf{R}_+$ существует неголоморфная функция $f \in C^1(D)$, удовлетворяющая (3), (4) и такая, что

$$\forall z \in D \quad M_f(\lambda_l(z)) = O(1) \text{ при } l \rightarrow +\infty, \quad l \in \mathbf{N}.$$

3) Для любых соизмеримых $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbf{R}_+$ существует неголоморфная функция $f \in C^1(D)$, удовлетворяющая (2), (3) и такая, что $M_f(z) = O(1)$ при $z \rightarrow 1$ по орициклам.

Теорема 2. 1) Пусть $f \in C(D)$,

$$\forall z \in D \quad M_f(\eta_l(z)) = o(1/l) \text{ при } l \rightarrow +\infty, \quad l \in \mathbf{N}, \quad (5)$$

и для некоторых $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbf{R}_+$

$$\int_{\partial(gK_{\alpha_1})} f(z) dz = \int_{\partial(gK_{\alpha_2})} f(z) dz = 0 \text{ для всех } g \in NA. \quad (6)$$

Тогда если $\alpha_1/\alpha_2 \notin \mathbf{Q}$, или

$$M_f(\eta_1(z)), M_f(z) = o(1) \quad (7)$$

при $z \rightarrow 1$ по гиперболическим прямым, то $f(z)$ голоморфна в D .

2) Для любых $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbf{R}_+$ существует неголоморфная функция $f \in C^1(D)$, удовлетворяющая (6), (7) и такая, что

$$\forall z \in D \quad M_f(\eta_l(z)), M_f(z) = O(1/l) \text{ при } l \rightarrow +\infty, \quad l \in \mathbf{N}.$$

3) Для любых соизмеримых $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbf{R}_+$ существует неголоморфная функция $f \in C^1(D)$, удовлетворяющая (5), (6) и такая, что

$$M_f(z) = O(1), M_f(\eta_1(z)) = o(1),$$

при $z \rightarrow 1$ по гиперболическим прямым.

Заметим, что достаточным условием выполнения (2) является

$$M_f(z) = O(1) \quad (8)$$

при $z \rightarrow 1$ по гиперболическим прямым

Соответственно (5) имеет место, если $M_f(z) = o(|1-z|)$ при $z \rightarrow 1$ по орициклам.

Если же выполнено (8), то из условия $M_f(z) = o(1)$ при $z \rightarrow 1$ по эквидистантам, следует (7).

References:

1. Хелгасон С. Группы и геометрический анализ. – М.: Мир, 1987. – 736 с.
2. Волчков В.В. Об одной проблеме Зальцмана и ее обобщениях // Матем. заметки. – 1993. – 53, вып.2. – С. 30–36.
3. Berenstein C.A. Harmonic analysis and the Pompeiu problem / C.A. Berenstein, M. Shahshahani // Amer. J. Math. – 1983. – Vol. 105. – P. 1217–1229.
4. Аграновский М.Л. Преобразование Фурье на $SL_2(\mathbf{R})$ и теоремы типа Морера // ДАН СССР. – 1978. – 243, № 6. – С.1353–1356.
5. Айзенберг Л.А. Вариации на тему теоремы Морера и проблемы Помпейю // Доклады АН России. – 1994. – 337, № 6. – С.709–712.
6. Волчков В.В. Преобразование Помпейю. – Донецк: ДонГУ, 1999. – 210 с.
7. Berenstein C.A. Variations on the theorem of Morera / C.A. Berenstein, D.C. Chang, D. Pascuas, L. Zalcman // Contemp. Math. – 1992. – 137. – P.63–78.
8. Volchkov V.V. Morera type theorems on the unit disk // Anal. Math. – 1997. – 20. – P.49–63.
9. Volchkov V.V. Integral Geometry and Convolution Equations. – Boston-London-Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2003. – 454 p.
10. Zalcman L. Analyticity and the Pompeiu problem // Arch. Rat. Mech. Anal. – 1972. – 47. – P.237–254.

PROPERTIES OF COVARIANCE
IN DEPENDENCES BETWEEN
INFORMATIONAL SIGNS.
APPLICATION OF COEFFICIENTS OF
CONTINGENCY SIMILARITY
– YULE’S AND FISCHER’S CORRELATION
COEFFICIENT IN THE ANALYSIS OF
MISTAKES IN THE TECHNOLOGICAL
INFORMATION PROCESSING CHAINS.
DETERMINATION OF FLUCTUATIONS OF
INFORMATION SIGNS IN TIME

T. Ivanova, associate professor, Candidate of Economic sciences,
Associate Professor
Moscow State Pedagogical University, Russia

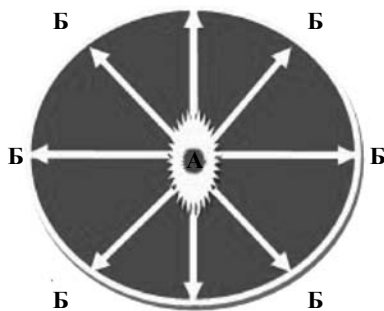
In this article, the author raises the question of the use of statistical, mathematical methods for the analysis of information and process, provides examples of such methods in information technology.

Keywords: Process chain, data processing, information workflow, system errors, mathematical methods.

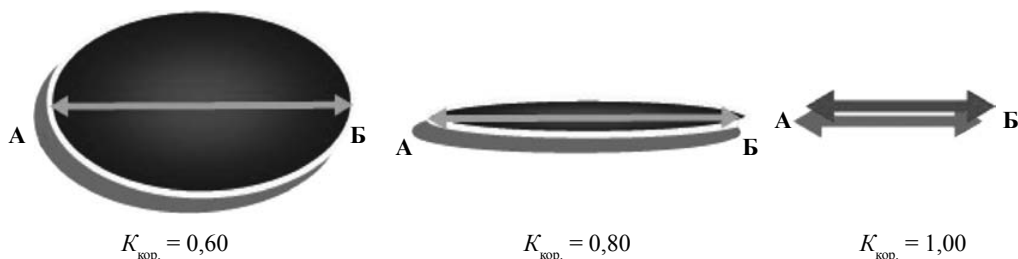
Conference participant, National championship
in scientific analytics, Open European and Asian
research analytics championship

При состоянии системы ковариации между точками А и Б, при реакции движения, вокруг точки А образуется окружность, а точка Б будет любая точка на линии окружности.

Система останавливается перед равновыбором (любой исход по любому направленному вектору). Коэффициент корреляции $K_{кор.} = 0$ (это и есть ковариация).



Что бы система вышла из равновесного состояния, необходимо хотя бы малая сплюснутость окружности по полюсам. Тогда коэффициент корреляции будет отличаться от 0. И начнется медленный процесс взаимного влияния (корреляции) двух систем.



СВОЙСТВА КОВАРИАЦИИ
В ЗАВИСИМОСТЯХ МЕЖДУ
ИНФОРМАЦИОННЫМИ ПРИЗНАКАМИ.
ПРИМЕНЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ
СХОДСТВА КОНТИНГЕНЦИИ – ЮЛА
И АССОЦИИИ ФИШЕРА ПРИ АНАЛИЗЕ
ОШИБОК В ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
ЦЕПОЧКАХ ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ.
ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЛЕБАНИЙ
ИНФОРМАЦИОННЫХ ПРИЗНАКОВ
ВО ВРЕМЕНИ

Иванова Т.А., канд. экон. наук, доцент
Московский государственный педагогический университет,
Россия

В данной статье автор поднимает вопрос об использовании статистических, математических методов для анализа работы информационно-технологического процесса, приводит примеры применения таких методов в информационных технологиях.

Ключевые слова: Технологические цепочки, обработка данных, информационно технологический процесс, ошибки системы, математические методы.

Участник конференции, Национального первенства
по научной аналитике, Открытого Европейско-Азиатского
первенства по научной аналитике

Если рассматривать прохождение программ в алгоритме конкретного задания Прямая линия будет означать «четкое беспрепятственное прохождение программных команд», далее эллипс – «разно выраженная задержка и препятствия в прохождении программ». И наконец, ровная окружность – «выполнение программ невозможно» – прерывание цепи последовательных действий. Эти сообщения можно использовать для отслеживания разного рода ошибок в технологических процессах прохождения программ через электронные устройства обработки данных.

Коэффициенты сходства двух признаков (логическая проверка).

Таблица 2×2.

Ошибки		1 пр.		Σ
		+	-	
2 пр.	+	a	b	a + b
	-	c	d	c + d
Σ		a + c	b + d	n

1 – ошибки в **формате данных** на электронных носителях («+» – есть ошибки; «-» – нет ошибок)

2 – ошибки в **прохождении программы** технологической цепочки алгоритма обработки данных («+» – есть ошибки; «-» – нет ошибок).

Формулы ассоциации и контингенции применяются в позициях логического квадрата, таблицы 2×2. В таких таблицах существуют установки: да–да; нет–нет; если не да, то нет (нет–да); если не нет, то да (да–нет).

Коэффициенты покажут зависимость (логику) двух существенных признаков, в данном случае прерывание прохождения пакета прикладных программ и обработку статистического множества данных.

Коэффициент ассоциации Юла:

$$A = \frac{ad - bc}{ad + bc}$$

показывает долю разности диагональных значений совпавших значений признаков (да–да и нет–нет) и не совпавших (да–нет и нет–да) первого порядка к их сумме.

Коэффициент контингенции Фишера:

$$K = \frac{ad - bc}{\sqrt{(a+c)(b+d)(a+b)(c+d)}}$$

Коэффициент контингенции Фишера отличается от коэффициента ассоциации Юла тем, что в делители (базе сравнения) берем среднегеометрическое значение произведения двух строковых суммы по всей матрице (табл. 1).

$$A = \frac{60 \cdot 70 - 30 \cdot 40}{60 \cdot 70 + 30 \cdot 40} = \frac{3000}{5400} \approx 0,556;$$

$$K = \frac{60 \cdot 70 - 30 \cdot 40}{\sqrt{90+110+100+100}} = \frac{3000}{9949,9} = 0,302.$$

Коэффициенты сходства показывают среднестатистическую (не ярко выраженную) зависимость (сходство) признаков, то есть выстраивается логический квадрат. (Существуют общепринятые, пограничные критерии: если $A \geq 0,5$; $K \geq 0,3$ можно говорить о наличие прямой или обратной связи между двумя рассматриваемыми признаками).

Если собираются данные о «сбоях» в информационных системах, то есть образуются ряды динамики во времени (например, недели, месяцы и т.д.), используют метод сопоставлений средних значений признака (средние детализованных разбиений и общие, агрегатные средние).

Например, если разные группы системных инженеров осуществляют дежурства и контроль за отладкой системы по дням недели, можно отследить недельные индексы сезонности ошибок за 4 недели месяца и выстроить график – сезонную волну. При расчете средние индексы сезонности по неделям взятые за месяц сопоставляются со средним недельным уровнем ряда динамики, то есть общая средняя за период.

Формула расчета индекса сезонности такая:

$$I_{S_i} = \frac{\bar{X}_i}{\bar{X}} \cdot 100\%$$

где \bar{X}_i – средний уровень i -го ряда динамики;

\bar{X} – средняя величина из всех уровней рядов динамики.

Эта формула представляет долю отдельной частной средней в общем среднем уровне ряда динамики.

Совокупность рассчитанных индексов характеризует сезонную волну.

Число ошибок за месяц (4 недели) по дням недели (табл. 2).

Таблица 1.

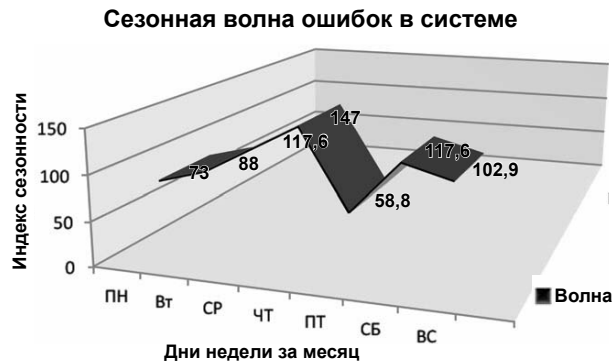
Данные коэффициенты сходства имеют значения в пределе от –1 до +1

Прохождение программ	Без прерывания	Прерывание обработки данных	Σ
Ошибки в информац. носителях			
Верное форматирование (без ошибок)	60	40	100
Неверные данные в инф. носителях Ошибки в форматировании	30	70	100
Σ	90	110	200

Таблица 2.

Дни недели	Число ошибок				Σ	\bar{X}_i	$I_{S_i} = \frac{\bar{X}_i}{\bar{X}} \cdot 100\%$
	1 нед.	2 нед.	3 нед.	4 нед.			
Пн.	2	1	1	1	5	1,25	73
Вт.	1	1	2	2	6	1,5	88
Ср.	2	1	2	3	8	2	117,6
Чт.	3	3	2	2	10	2,5	147,0
Пт.	1	1	1	1	4	1,0	58,8
Сб.	2	2	2	2	8	2,0	117,6
Вс.	1	2	2	2	7	1,75	102,9
					48	$\bar{X} = 1,7$	

Волна сезонности понедельных ошибок за месяц будет такой:



Из графика следует, что максимальный экстремум сезонной волны за месяц приходится на четверг, это значит, что группе системных инженеров необходимо серьезно проанализировать ошибки и осуществить необходимую коррекцию в проблемных областях технологической цепочки обработки данных.

Таким образом, возможен своеобразный симбиоз статистико-математических методов и информационных систем. Особенно это направление полезно в областях соединения информатики и математики. Так, например, при

изучении мобильных и имобильных элементов информационных систем можно использовать первый метод, описанный в данной статье (ковариация – она же имобильность, неподвижность) или тем же методом отслеживать состояния, когда система переходит в «спящий» режим; вторые методы хороши для анализа логической амбивалентности (то есть противоречивости) отдельных позиций системы, третий метод можно применять при анализе деструкции иерархических зависимостей в информационных системах, изучении дистрибуции и редистрибуции информационных сложенных.

В процессе образования данная корреляция математических методов и информатики призвана научить обучающихся апеллировать математическими знаниями в исследовании крупных информационных массивов и анализе алгоритмов обработки данных.

References:

1. Статистический словарь. – М.: Энциклопедия, 2007.
2. Статистико-математическая энциклопедия. – М.: Энциклопедия, 2004.
3. Математическая статистика; учебник / В.С. Мхитарян. – М.: Финансы и статистика, 2002.



The AICAC Secretariat

Tel: + 12 024700848
Tel: + 44 2088168055
e-mail: secretariat@court-inter.us
skype: court-inter



AMERICAN INTERNATIONAL
COMMERCIAL
ARBITRATION COURT

The American International Commercial Arbitration Court LLC – international non-government independent permanent arbitration institution, which organizes and executes the arbitral and other alternative methods of resolution of international commercial civil legal disputes, and other disputes arising from agreements and contracts.

The Arbitration Court has the right to consider disputes arising from arbitration clauses included into economic and commercial agreements signed between states.

Upon request of interested parties, the Arbitration Court assists in the organization of ad hoc arbitration.

For additional information
please visit:
court-inter.us

ON INCREASING THE EFFICIENCY OF FREQUENCY CONVERSION IN METAMATERIALS

R.J. Kasumova, Dr. of Physico-Mathematical sciences
Baku State University, Azerbaijan

In this article calculation of the optimal length of a metamaterial for effective transformation of frequency on the given length in similar environments is considered.

Keywords: frequency conversion, metamaterial.

Conference participant

As for back as 1967 the Soviet physicist Victor Veselago showed that media with negative indices of magnetic permeability μ and dielectric permittivity ε at the same time, media called metamaterials, must possess the negative index of refraction. The values of these indices, in their turn, depend on wave length of electromagnetic radiation passing through the medium [1]. The achievements in experimental elaboration of metamaterials aroused new interest for theoretical and experimental researches of optical nonlinear properties of similar artificially created media with unique electromagnetic properties [2–8].

In recent years there have been carried out studies on elaboration of metamaterials refracting visible light. Generation of optical harmonics in metamaterials was considered in a series of works, mainly, in constant-field approximation [4, 6–8]. In contrast to constant-field approximation, constant-intensity approximation of fundamental radiation [9–10] does not impose any restrictions for phase of interacting waves. It permits to make more strict analysis of nonlinear interaction of waves in material with regard for change of interacting waves phases. In constant-intensity approximation it is possible to depict physical peculiarities of nonlinear process [11–12], which are unamenable to study within the frames of widely applied constant-field approximation. The investigations in this direction go on.

As a consequence, in the present work the results of further study are reported. Just namely analysis of the ways of increasing the efficiency of radiation energy conversion into second harmonic in metamaterials. It is particularly shown that maximum of the efficiency of conversion to second harmonic depends directly on a full length l of investigated metamaterial.

The process of generation of second harmonic in metamaterial is described by the system of reduced equations of kind [4]

$$\begin{aligned} \frac{dA_1}{dz} + \delta_1 A_1 &= i \frac{8\pi \varepsilon_1 \omega_1^2}{k_1 c^2} \chi_{eff}^{(2)} A_1^* A_2 \exp(i\Delta z), \\ \frac{dA_2}{dz} + \delta_2 A_2 &= i \frac{4\pi \varepsilon_2 \omega_2^2}{k_2 c^2} \chi_{eff}^{(2)} A_1^2 \exp(-i\Delta z), \end{aligned} \quad (1)$$

where $A_{1,2}$ are complex amplitudes of pump wave and second harmonic at frequencies $\omega_{1,2}$ respectively, $\delta_{1,2}$ are the coefficients of wave absorption in metamaterial at frequencies $\omega_{1,2}$ respectively, $\varepsilon_{1,2}$, $\mu_{1,2}$ are dielectric permittivity and magnetic permeability of metamaterial at corresponding frequencies, $\Delta = k_2 - 2k_1$ is the phase mismatch between interacting waves, $k_{1,2}$ ($k_{1,2} > 0$) are modulus of wave vectors $\vec{k}_{1,2}$ directed towards the opposite to axis z , $\chi_{eff}^{(2)}$ is the efficient quadratic susceptibility of material [13].

We carry out study in following boundary conditions

$$A_1(z=0) = A_{10} \exp(i\varphi_{10}), \quad A_2(z=l) = 0. \quad (2)$$

There $z=0$ corresponds to an entrance to metamaterial, φ_{10} is an initial phase of pump wave at the entrance to nonlinear medium.

By solving the system of reduced equations in constant-intensity approximation of fundamental radiation with regard for (2), for complex amplitude of harmonic wave at length z of nonlinear medium there was received ($\delta_{1,2} = 0$) [10]

$$\begin{aligned} A_2(z) &= \frac{i\gamma_2 A_{10}^2}{\lambda' + \frac{i\Delta}{2} \operatorname{tg} \lambda' l} (\sin \lambda' z - \operatorname{tg} \lambda' l \cos \lambda' z) \times \\ &\times \exp(i2\varphi_{10} - i\Delta z/2) \end{aligned} \quad (3)$$

where

$$\lambda'^2 = \frac{\Delta^2}{4} - 2\Gamma^2, \quad \Gamma^2 = \gamma_1 \gamma_2 I_{10}, \quad I_j = A_j A_j^*.$$

For the efficiency of conversion of pump wave energy to energy of harmonic wave (or given intensity of second harmonic wave) in metamaterial (3) we receive

$$\eta_2(z) = \tilde{I}_2 = \frac{I_2(z)}{I_{10}} = \gamma_2^2 I_{10} \frac{(\sinh \lambda z - \tanh \lambda l \cosh \lambda z)^2}{2\Gamma^2 + \frac{\Delta^2}{4} (\tanh^2 \lambda l - 1)} \quad (4)$$

at

$$\Gamma^2 > \frac{\Delta^2}{8}, \quad \text{где } \lambda^2 = 2\Gamma^2 - \frac{\Delta^2}{4}.$$

As is known, behavior of dependence of conversion efficiency sharply differs from usual dependence of conversion efficiency $\eta_2(z)$ in natural material. If in general quadratic nonlinear medium there took place strongly pronounced maximum reached on coherent length of medium, then in considered case of medium with negative refraction there is observed monotonous behavior of dependence. With this, metamaterial plays the role of a mirror reflecting harmonic wave on entry of metamaterial, i.e. maximum of conversion falls not on outlet, but an entry of metamaterial. In other words, excited radiation of harmonic is directed to meet exciting pump wave.

The numerical analysis of the analytical expression of maximum efficiency of conversion $\eta_{2,\max}(z)$ in metamaterial, received with regard for phase changes of interacting waves depending on full given length l of metamaterial is offered in Figure.

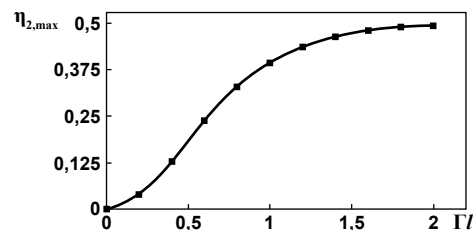


Fig. Dependence of maximum efficiency of conversion $\eta_{2,\max}(z)$ on the given full length of metamaterial Γl at $\Delta z/2 = 0,08$, $\delta_{1,2} = 0$

In figure it is seen that maximum value of the efficiency acquires the constant value, i.e. in dependence the regime of saturation is observed. Hence practically an important conclusion follows. In constant-intensity approximation it is possible to calculate the optimum value of full length l of metamaterial for the purpose of obtaining the efficient frequency conversion on this length of similar media.

References:

1. V.G. Veselago. Usp. Fizich. Nauk, 92 (1967) 517-526.
2. Marqués Ricardo; Kivshar Yuri. Appl. Phys. Lett. 95, (2009) 084105-084109.
3. Fu Xiang Wang, F.J. Rodriguez, Hannu Husu, M. Kauranen, Nonlinear Optics and Quantum Optics, 40 (2010) 43-56.
4. A.K. Popov, and V.M. Shalaev, Appl. Phys. B 84 (2006) 131-137.
5. S.M. Orbons, D. Freeman, B. Luther-Davies, B.C. Gibson,

S.T. Huntington, D.N. Jamieson, A. Roberts. Physica B, 394 (2007) 176-179.

6. I.R. Gabitov, B. Kennedy, A.I. Maimistov, IEEE J. Select. Top. Quantum Electron., 16 (2) (2010) 401-409.

7. V.M. Agranovich, Y.R. Shen, R.H. Baughman, and Zakhidov, Phys. Rev. B 69 (2004) 165112-165119.

8. I.V. Shadrivov, A.A. Zharov, and Yu.S. Kivshar, JOSA B 23(2006) 529-534.

9. Z.H. Tagiev, A.S. Chirkin, Zh.Eksper. Teor. Fiz. [Sov. Phys. JETP] 73 (1977) 1271-1282.

10. Z.H. Tagiev, R.J. Kasumova, R.A. Salmanova, and N.V. Kerimova, J. Opt. B: Quantum Semiclas. Opt., 3, (2001) 84-87.

11. Z.H. Tagiev, R.J. Kasumova, L.S. Gadjieva, Journal of Russian Laser Research, 32 (2011) 188-199.

12. R.J. Kasumova, L.S. Gadjieva, Proc. IV International Scientific – Practical Conference, Kiev-Colombia, 4 (2011) 216-217.

13. F. Zernike, and J.E. Midwinter, Applied Nonlinear Optics, New-York: Willey, 261p (1973).



WORLD RESEARCH ANALYTICS FEDERATION

Research Analytics Federations of various countries and continents, as well as the World Research Analytics Federation are public associations created for geographic and status consolidation of the GISAP participants, representation and protection of their collective interests, organization of communications between National Research Analytics Federations and between members of the GISAP.

Federations are formed at the initiative or with the assistance of official partners of the IASHE - Federations Administrators.

Federations do not have the status of legal entities, do not require state registration and acquire official status when the IASHE registers a corresponding application of an Administrator and not less than 10 members (founders) of a federation and its Statute or Regulations adopted by the founders.

If you wish to know more, please visit:

<http://gisap.eu>

ABOUT ONE INVERSE PROBLEM OF THE FILTRATION THEORY CONNECTED WITH CLARIFICATION OF COLLECTOR PROPERTIES OF THE BED IN OIL-AND-GAS DEPOSITS

N. Shazhdekeeva, Candidate of Mathematical and Physical sciences, Full Professor
Atyrau State University named of Kh. Dosmukhamedova, Kazakhstan

The subject of the research is the inverse problem of filtration theory, which allows objectively clarify the corrective features of productive formation while using the actual data. The dependency from the time of liquid, gas and formation pressure capacity by the wells is required for this purpose.

Conference participant, National championship in scientific analytics, Open European and Asian research analytics championship

Постановка обратных задач вытекает из известного факта о том, что часто в водоносных пластах имеет место естественный фильтрационный поток воды. Данное обстоятельство находит своё отражение в том, что пластовые давления в пьезометрических скважинах различаются между собой. Соответствующие различия связаны с особенностями строения водоносного пласта и изменениями его коллекторских свойств. Поэтому естественным является желание использовать информацию о давлениях и фильтрационных параметрах по скважинам для постановки и решения рассмотренных обратных задач.

Гидрогеологические исследования показывают, что естественные фильтрационные потоки характеризуются еще одной особенностью. Вследствие наличия таких потоков имеют место определённые распределения в воде в растворённом виде углеводородных и неуглеводородных компонентов. За геологические длительные времена эти компоненты, которые могут восприниматься как определённые индикаторы, переносящихся по водоносному пласту от сформировавшихся нефтяных или систем газовых залежей. Концентрация этих индикаторов по площади изменчива, что опять связано с особенностями строений водоносного пласта и его коллекторскими свойствами, известно, что такие нестационарные процессы переноса отдельных компонентов могут описываться уравнением конвективной диффузии [1].

Уравнение конвективной диффузии в случае плоского фильтрационного потока имеет вид [2]:

$$m \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\lambda_1 v_1^2 + \lambda_2 v_2^2}{\sqrt{v_1^2 + v_2^2}} \frac{dc}{dx} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\lambda_1 v_2^2 + \lambda_2 v_1^2}{\sqrt{v_1^2 + v_2^2}} \frac{dc}{dy} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (v_1 c), \quad (1)$$

где m – коэффициент пористости; c – концентрация рассматриваемого компонента; λ_1, λ_2 – соответственно продольные и поперечные параметры рассеивания среды, пос-

ОБ ОДНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ ФИЛЬТРАЦИИ ПО УТОЧНЕНИЮ КОЛЛЕКТОРСКИХ СВОЙСТВ ПЛАСТА В НЕФТЕГАЗОВЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЯХ

Шаждекеева Н.К., канд. физ.-мат. наук, доцент
Атырауский государственный университет имени Х. Досмухамедова, Казахстан

В данной работе исследуется обратная задача теории фильтрации, которая на объективной основе позволяет уточнить коллекторские свойства продуктивного пласта при использовании фактических данных. Для этой цели необходимы зависимости от времени дебитов жидкости, газа и пластовых давлений по скважинам.

Участник конференции, Национального первенства по научной аналитике, Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

тоянные (имеют размерности длины); v_1, v_2 – компоненты скорости фильтрации соответственно по осям x и y .

Если для уравнения (1) задать граничные

$$\frac{\partial c}{\partial n} = 0, \quad (x, y) \in \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4; \quad c = 1, \quad (x, y) \in \Gamma_1 \quad (2)$$

и начальное условие

$$c(x, y) = 0; \quad t = 0, \quad (3)$$

то получим прямую краевую задачу для определения поля концентраций по всей площади водоносного пласта на разные моменты времени, в том числе на момент проведенных расчётов (на сегодняшний день).

Скорости фильтрации v_1 и v_2 зависят от распределения давления P^* по площади. Следовательно, для того чтобы решить задачу (1)–(3) необходимо иметь решение задачи фильтрация воды в неоднородном по коллекторским свойствам водоносном пласте с выделенной газовой (нефтяной) залежью, который описывается дифференциальным уравнением эллиптического типа относительно приведенного давления P^* :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[k(x, y) \cdot h(x, y) \frac{\partial P^*}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[k(x, y) \cdot h(x, y) \frac{\partial P^*}{\partial y} \right] = 0. \quad (4)$$

Для решения интересующей нас прямой задачи интегрирование уравнения (4) осуществляется при следующих краевых условиях:

$$\frac{\partial P^*}{\partial n} = 0, \quad (x, y) \in \Gamma_1, \Gamma_2; \quad (5)$$

$$P^* = P_n^* = \text{const}, \quad (x, y) \in \Gamma_3;$$

$$P^* = P_p^* = \text{const}, \quad (x, y) \in \Gamma_4. \quad (6)$$

Итак, для естественного фильтрационного потока в водоносном пласте с выделенной газовой (нефтяной) залежью справедлива прямая краевая задача (4)–(6), где $P^* = P \pm \rho_B g l$; P – давление в точке с координатами x и y ; ρ_B – плотность воды; g – ускорение свободного падения;

l – расстояние по вертикали от данной точки с координатами x и y до плоскости приведения; n – внешняя по отношению к G нормаль; k – коэффициент проницаемости пласта; h – толщина пласта; Γ_1 – граница газовой (нефтяной) залежи; Γ_2 – непроницаемые границы водоносного пласта; Γ_3 – контур области питания; Γ_4 – контур области разгрузки.

Обратной зависимости P^* от C нет, следовательно, задачи (4)–(6) и (1)–(3) расщепляются на две автономные прямые краевые задачи. Итак, при заданных коллекторских свойствах пласта k и h , λ_1 , λ_2 при граничных условиях решение уравнения позволяет определить распределение приведенного давления P^* по всей площади водоносного пласта. Далее при заданных коллекторских свойствах водоносного пласта k , h , m при начальном условии (3) и граничных (2), решение уравнения (1) с использованием функции P^* из предыдущей задачи, позволяет определить распределения концентрации C по всей площади водоносного пласта.

Постановка обратной задачи. Предполагаем, что известны фактические значения $P^*(x, y)$ и $C(x, y, t)$ по всей площади водоносного пласта на конец отрезка времени $[0, T]$ на сегодняшний день. Имеем P^* и C в скважинах в момент геологического времени T , данные о геометрии пласта и приближенные значения его коллекторских свойств. Необходимо определить (уточнить) коллекторские (фильтрационные и емкостные) свойства во всех точках водоносного пласта, а также условия на контурах областей питания и разгрузки на основе имеющихся фактических данных. Будем решать обратную задачу как оптимизационную. Построим функционал J равный сумме J_1 и J_2 . Очевидно, что этот функционал зависит от коллекторских свойств пласта:

$$\begin{aligned}
 J \{P_n^*, P_p^*, b, m, \lambda_1, \lambda_2\} &= J_1(P_n^*, P_p^*, b) + J_2(m, \lambda_1, \lambda_2) = \\
 &= \sum_{i=1}^N [(P_{\text{рас},i}^* - P_{\Phi_i}^*)^2 + w_i (b_{\text{рас},i} - b_{\Phi_i})^2] + \\
 &+ \int_0^T \sum_{i=1}^N \gamma_i [C_{\text{рас},i} - C_{\Phi_i}]^2 dt. \quad (7)
 \end{aligned}$$

Обратная задача звучит следующим образом: найти такие значения P_n^* , P_p^* , b , m , λ_1 , λ_2 которые минимизируют функционал (7).

В результате решения этой задачи определяются коллекторские свойства некоторой эквивалентной геологической модели пласта, обеспечивающие наилучшее совпадение расчетных и фактических значений приведенных давлений, фильтрационных параметров и концентраций с точки зрения введённого критерия и принятой математической модели фильтрации. Для минимизации функционала используем итерационный градиентный метод, напри-

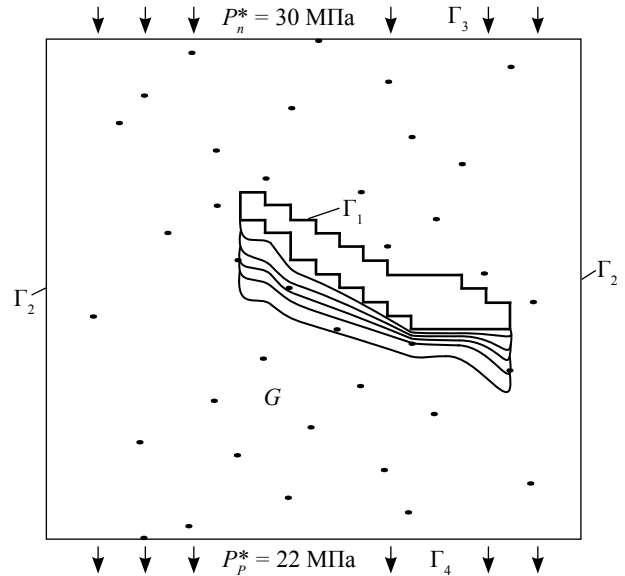


Рис. 1. Карта изобар и схема размещения разведочных скважин в водоносном пласте неоднородном по коллекторским свойствам

мер, для уточнения коэффициента пористости в разных точках пласта имеем следующее i рекуррентное соотношение

$$m^{(s+1)} = m^{(s)} - \lambda_m^{(s)} \frac{\partial J}{\partial m}, \quad (8)$$

где s – номер итерации.

Аналогично записываются градиентные процедуры для всех других искомым параметров.

В качестве нулевого приближения для значений величин P_n^* , P_p^* , b , m , λ_1 , λ_2 могут быть использованы геологические карты, данные геофизических и гидродинамических исследований скважин и пласта. Для реализации градиентных процедур типа необходимо вычислять функциональные производные. С использованием полученных результатов проведены численные эксперименты с данными конкретного месторождения Атырауской области.

References:

1. Булыгин В.Я. Один конечно-разностный метод восстановления функции пластового давления и гидропроницаемости пластов // Сб.: Теорет. и эксперим. исслед. разработки нефтяных месторожд. – Казань: Изд-во Казанск. универс., 1964. – С. 81-86.
2. Максимов А.М., Цыпкин Г.Г. Образование двухфазной зоны при взаимодействии талых и мерзлых пород с раствором соли. – М.: Институт проблем механики АН, 1987. – С. 59.

CONDITIONS OF CHANGE OF INDICATORS AND INDICATORNESS IN PHASES OF THE ORGANIZATION LIFE CYCLE

A. Kryukov, Doctor of Economics, Professor,
Head of a chair
Siberian Federal University, Russia
I. Kriukova, Economics lecturer
General secondary school № 10, Krasnoyarsk, Russia

Authors consider conditions of changing indicators and phase changes in the development of organizations on the basis of results of proving theorems of random values of their indexes measurement.

Keywords: phase change, development, proof, theorems of random measurement values, indexes of indicators, conditions of changing.

Conference participants, National championship
in scientific analytics, Open European and Asian
research analytics championship

Введение. Необходимость своевременной замены индикаторов по результатам измерения показателей индикаторов экономического развития организаций и смены фаз в их циклическом развитии потребовали доказательств теорем о случайных значениях измеряемых показателей индикаторов и выявления условий их замены.

Цель. Выявить условия замены индикаторов по доказательству теорем о случайных значениях измеряемых их показателей.

Задачи.

– Обосновать доказательство теоремы о случайных значениях измеряемых показателей индикаторов при росте показателей.

– Обосновать доказательство теоремы о случайных значениях измеряемых показателей индикаторов, если значения уменьшаются.

– Выявить условия смены фаз в развитии организаций.

– Определить условия замены индикаторов.

Под действием внешних и внутренних факторов изменяются значения индикаторов экономического и финансового состояния организаций [1]. К ним можно отнести выработку на одного работника и темп ее изменения, фондотдачу одного рубля основных средств и его темп изменения, коэффициенты рентабельности и их темпы изменения, долю рынка реализованной продукции и ее темп изменения. В них интегрируются воздействия и внутренних, и внешних факторов на организацию.

К внешним факторам относятся: фаза экономического цикла рыночной экономики, цена ограниченных ресурсов, циклическое изменение нужд потребителей, их платежеспособный спрос, изменение ниш рынка. Внутренними факторами становятся: технологии и орудия труда в форме технологического передела, качество и индивидуализация продукции, энергопотребление и малоотходность процессов производства, потенциал рабочей силы и его адаптируемость к изменениям требований рынка.

Обозначенные индикаторы могут быть измерены ежеквартально, используя известные программные продукты, с пересчетом накопительных балансов системы российского бухгалтерского учета на поквартальные изменения. Для

УСЛОВИЯ СМЕНЫ ИНДИКАТОРОВ И ИНДИКАТОРНОСТЬ В ФАЗАХ ЖИЗНЕННОГО ЦИКЛА ОРГАНИЗАЦИИ

Крюков А.Ф., д-р экон. наук, проф., зав. кафедрой
Сибирский федеральный университет, Россия
Крюкова И.А. преподаватель экономики
СШ №10 МО г. Красноярска, Россия

В работе рассмотрены условия замены индикаторов и смены фаз в развитии организаций по результатам доказательства теорем о случайных значениях измерения их показателей.

Ключевые слова: Смена фаз, Развитие. Доказательство, Теоремы о случайных значениях измерения, Показатели индикаторов, Условия замены.

Участники конференции, Национального первенства
по научной аналитике, Открытого Европейско-Азиатского
первенства по научной аналитике

оценки и учета их динамических свойств используются статистические свойства стохастических процессов [2]. Известно, что статистические значения показателей индикаторов вычисляются по их средним значениям – \bar{X} за n – отчетных периодов:

$$\bar{X} = \frac{\sum_{i=1}^n X_i}{n}. \quad (1)$$

Если выявилось при измерениях, что $\bar{X} \gg X_i^{\min}$ или $\bar{X} \ll X_i^{\max}$, то необходимо отказаться от используемого индикатора и заменить его более статистически достоверным.

Изменения среднего значения показаний индикатора от его текущих измерений определяется средне квадратичным отклонением – σ , вычисляемым по известному выражению (2)

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}{n-1}}. \quad (2)$$

Если среднеквадратичное отклонение по величине становится больше ($0.3\bar{X}$), то надежность показаний используемого индикатора упала и следует заменить тип индикатора либо применить коэффициентные или матричные индикаторы.

Для оценки колеблемости значений индикатора теория статистики предлагает использовать коэффициент вариации – γ , который вычисляется через отношение величин среднеквадратичного отклонения по уравнению (2) и среднего значения индикатора по выражению (1)

$$\gamma = \frac{\sigma}{\bar{X}} 100. \quad (3)$$

Рассчитав коэффициент вариации по формуле (3), является риск доверия к показаниям измерений используемых индикаторов.

Если $\gamma < 10\%$, то риск недоверия к показателям индикатора самый низкий. Величины показаний индикаторов статистически достоверны.

При $10\% \leq \gamma < 25\%$ значения индикатора относят к среднерисковым и необходимо исследователям применить

и другие индикаторы. Например, возможно дополнение индикатора выработки на одного работника индикаторами по коэффициентам рентабельности.

Если $\gamma > 35\%$, то недоверие к показаниям используемого индикатора самое высокое и возникают все условия для его замены с переходом, например, от анализа абсолютных значений показателей к анализу темпов их изменений.

Рассчитав σ и γ , аналитики организации готовят для менеджеров предложения по доверию или недоверию к показаниям действующего индикатора. Вырабатываются предложения по использованию других вариантов индикаторов, либо по применению комплексного, к примеру, матричного индикатора финансово-экономического состояния организации [1].

Случайный характер значений измеренных индикаторов состояния организации в рыночных отношениях, характеризуется средней величиной случайных показателей индикатора $-X_{ij}$. При этом статистически $-\bar{X}_{ij}$ определяется при измерении j от 1 до n по известному выражению:

$$\bar{X}_{ij} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n X_{ij}. \quad (4)$$

Если наблюдается рост финансово-экономических показателей и увеличение значений показателей индикаторов этого роста, то их последующие средние значения удовлетворяют соотношению:

$$\bar{X}_{i(j+1)} > \bar{X}_{ij}. \quad (5)$$

Теорема. Требуется доказать, если средняя величина последующих измерений показателя в стохастическом процессе больше среднего значения предыдущего измерения показателей индикатора (неравенство (5)), то каждое последующее измерение случайной величины индикатора $X_{i(j+1)}$ будет больше предыдущего среднего значения i – индикатора \bar{X} .

Дано: $\bar{X}_{i(j+1)} > \bar{X}_{ij}. \quad (5)$

Требуется доказать: $X_{i(j+1)} > \bar{X}_{ij}. \quad (6)$

Доказательство.

Определим среднее последующих значений i – индикатора при измерении его показателей от 1 до $(n + 1)$ по выражению (7)

$$\bar{X}_{i(j+1)} = \frac{1}{n+1} \sum_{j=1}^{n+1} X_{ij}. \quad (7)$$

Преобразуем выражение (7) с учётом значений

$$\bar{X}_{ij} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n X_{ij} \text{ и } \bar{X}_{i(j+1)} > \bar{X}_{ij}.$$

При этом сумму выполним через выделение последующего измерения случайной величины i – индикатора $X_{i(j+1)}$. Тогда:

$$\bar{X}_{i(j+1)} = X_{i(j+1)} + \sum_{j=1}^n X_{ij}.$$

Подставим полученное выражение в уравнение (7). После преобразований введем его в неравенство (5) и получим:

$$\frac{1}{n+1} \left(X_{i(j+1)} + \sum_{j=1}^n X_{ij} \right) > \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n X_{ij};$$

$$X_{i(j+1)} > \frac{n+1}{n} \sum_{j=1}^n X_{ij} - \sum_{j=1}^n X_{ij}.$$

Так как $(n + 1) > 0$, то знак неравенства не изменится при умножении правой и левой частей неравенства на $(n + 1)$, в таком случае получаем после преобразований:

$$X_{i(j+1)} > \frac{n+1-n}{n} \sum_{j=1}^n X_{ij}; \quad (8)$$

$$X_{i(j+1)} > \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n X_{ij}.$$

Что и требовалось доказать, так как из выражений (8) и (4) следует:

$$X_{i(j+1)} > \bar{X}_{ij}.$$

Тогда в фазе роста при циклическом развитии организации каждое последующее значение случайно измеренного индикатора будет больше среднего значения предыдущих измерений.

Справедливо и обратное, если каждое последующее измерение индикатора дает значение большее, чем среднее значение в предыдущих измерениях, то развитие организации находится в фазе роста.

В анализе кризисной организации наблюдается падение её финансово-экономических показателей. При этом осуществляется измерение значений

X_{ij} – индикаторов состояния: выручки, прибыли, выработки на одного работника и темпов ее изменений, фондоотдачи одного рубля основных средств и его темпов изменения, коэффициентов рентабельности и их темпов изменения, доли рынка реализованной продукции и ее темпов изменения, текучести кадров и темпов её изменения. По ним (при значительном снижении, более чем на 15%, показателей X_{ij}) устанавливается степень опасности состояния кризиса предприятия (для быстрого и своевременного принятия менеджерами стратегических и тактических решений в кризисной организации).

Для целей анализа перехода в другие фазы развития организации необходимо доказательство следующей теоремы.

Теорема. Если средняя величина последующих измерений показателя меньше среднего значения предыдущего измерения показателей индикатора в стохастическом процессе, то каждое последующее измерение случайной величины индикатора $X_{i(j+1)}$ будет меньше предыдущего среднего значения i – индикатора \bar{X}_{ij}

Дано: $\bar{X}_{i(j+1)} < \bar{X}_{ij} \quad (9)$

Требуется доказать: $X_{i(j+1)} < \bar{X}_{ij} \quad (10)$

Доказательство.

Проведем доказательство от противного. Пусть предположим, что выполняется:

$$X_{i(j+1)} \geq \bar{X}_{ij} \quad (11)$$

для обеспечения неравенства $\bar{X}_{i(j+1)} < \bar{X}_{ij}$. Преобразуем среднее последующих значений i – индикатора при измерении его показателей от 1 до $(n + 1)$ по выражению (7). Но сумму

$$\sum_{j=1}^{n+1} X_{ij}$$

выполним через выделение последующего измерения случайной величины i – индикатора $X_{i(j+1)}$:

$$\bar{X}_{i(j+1)} = \frac{1}{n+1} \sum_{j=1}^{n+1} X_{ij}; \quad (7)$$

$$\bar{X}_{i(j+1)} = \frac{1}{n+1} \left(X_{i(j+1)} + \sum_{j=1}^n X_{ij} \right). \quad (12)$$

Подставим в полученное выражение предположение $X_{i(j+1)} \geq \bar{X}_{ij}$. И равенство (12) становится неравенством при замене $X_{i(j+1)}$ не большим значением \bar{X}_{ij}

$$\bar{X}_{i(j+1)} \geq \frac{1}{n+1} \left(\bar{X}_{ij} + \sum_{j=1}^n X_{ij} \right). \quad (13)$$

Зная выражение для \bar{X}_{ij} из уравнения (4), получим, что

$$\sum_{j=1}^n X_{ij} = n \bar{X}_{ij}.$$

Тогда после преобразований неравенства (13) имеем:

$$\bar{X}_{i(j+1)} \geq \frac{1}{n+1} (\bar{X}_{ij} + n \bar{X}_{ij}) \quad \text{или} \quad \bar{X}_{i(j+1)} \geq \frac{1}{n+1} \bar{X}_{ij} (n+1).$$

В этом случае:

$$\bar{X}_{i(j+1)} \geq \bar{X}_{ij},$$

что противоречит условию теоремы. Следовательно, предположение (11) неверно и $X_{i(j+1)} < \bar{X}_{ij}$, что и требовалось доказать.

В таком случае в фазе кризиса циклического развития организации каждое последующее измерение случайного значения индикатора будет меньше среднего значения предыдущих измерений индикатора (10).

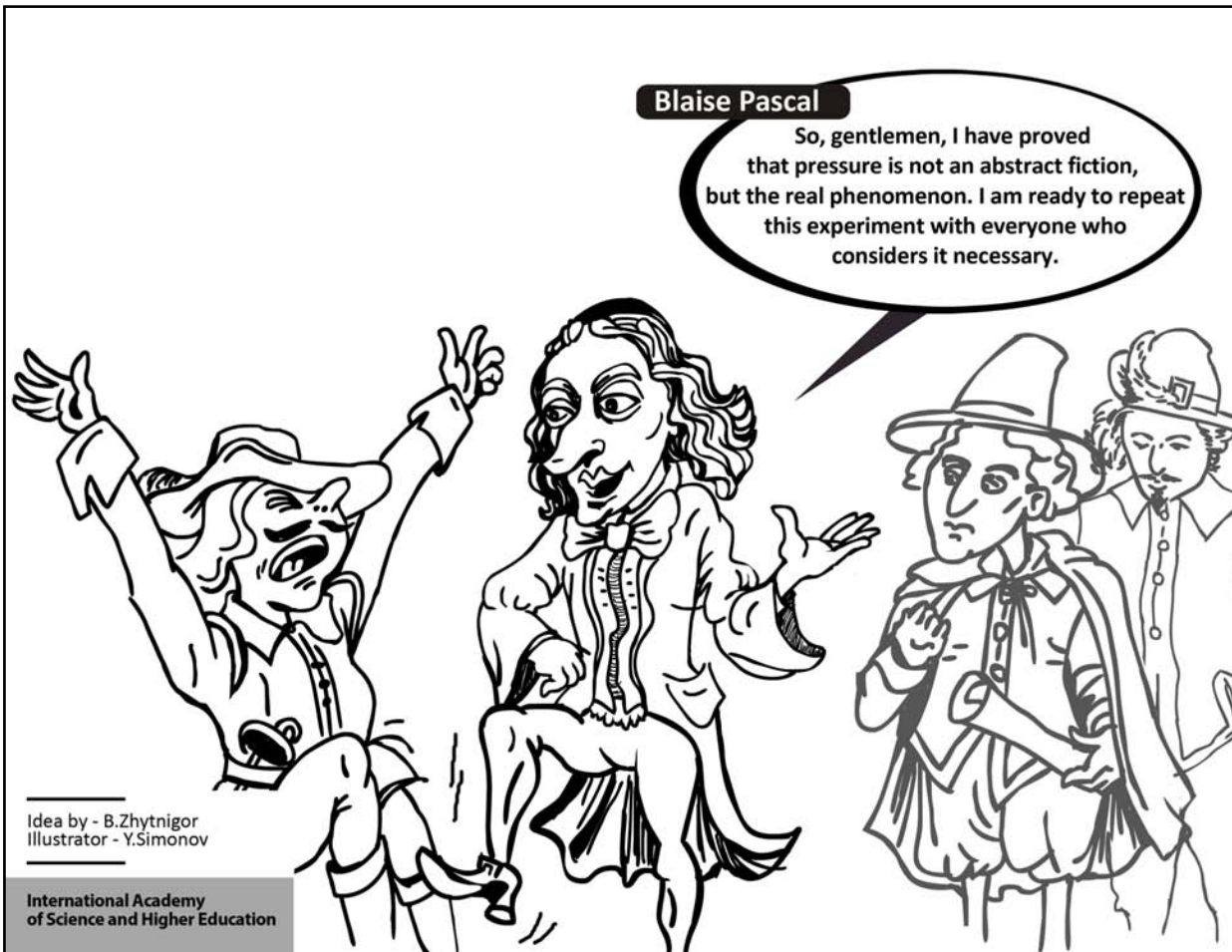
Справедливо и обратное, если каждое последующее измерение индикатора даёт значение меньше, чем его среднее значение в предыдущих измерениях, то организация находится в фазе кризиса.

В таком случае по доказанным теоремам следует, что, если $X_{i(j+1)} \geq \bar{X}_{ij}$, то (при измеряемых в последующем показателях индикатора) в развитии организации наступил переход от рецессии к фазе роста.

Тогда, если: $X_{i(j+1)} < \bar{X}_{ij}$, то (при измеряемых в последующем показателях индикатора) организация в своем развитии по экономическому циклу из стагнации оказывается в фазе кризиса.

References:

1. Шеремет А.Д. Методика финансового анализа деятельности коммерческих организаций / А.Д. Шеремет, Г.В. Негашев. – М.: Инфра – М, 2010. – 210 с.
2. Суринов А.Г. Статистика доходов населения / А.Г. Суринов. – М.: ЗАО Финстатинформ, 2001. – 380 с.



Idea by - B.Zhytnigor
Illustrator - Y.Simonov

International Academy
of Science and Higher Education

PROBLEM OF CONDENSATION IN STATISTICAL PHYSICS

M. Ushcats, Candidate of Technical sciences, Associate Professor
Admiral Makarov National University of Shipbuilding, Ukraine

The author considers an accurate expression for the cluster expansion of the configuration integral of the system of interacting particles. Investigations of this expression indicate the beginning of the gas-liquid transition at the singularity points of isothermal compressibility. It has also been shown that the adequacy boundary of the virial equation of state corresponds to these points – not the virial range singularities. At the high density region the inappropriate behavior of the cluster expansion has been discovered that may be related to the infinite limits of the cluster integrals, i.e. their independency on density.

Keywords: configuration integral, cluster expansion, virial equation of state, irreducible integral, virial coefficient.

Conference participant, National championship
in scientific analytics, Open European and Asian
research analytics championship

В современной физике до сих пор не существует строгой статистической теории фазовых переходов первого рода [1]. Известно, что практически любой потенциал парного взаимодействия, учитывающий и притяжение, и отталкивание молекул, должен при определенных условиях приводить к фазовым превращениям [2]. Это же подтверждают и различные численные эксперименты на базе методов Монте-Карло [3–7] и молекулярной динамики [6–11], но даже эмпирические [7, 8] (или полуэмпирические [12, 13]) уравнения состояния имеют в этой области термодинамически запрещенные участки с отрицательной сжимаемостью (так называемая, петля Ван-дер-Ваальса). Эти невозможные ни на практике, ни с точки зрения равновесной статистики, состояния искусственно заменяют участком постоянного давления, руководствуясь термодинамическими соображениями о равновесном сосуществовании двух фаз (например, правилом Максвелла [14]).

Один из основных современных статистических инструментов описания систем в плотных состояниях – уравнение Орнштейна-Цернике (ОЦ) [15] – имеет свое теоретическое обоснование в рамках иерархии уравнений Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона (ББГКИ) [16], и, по сути, является эквивалентным классическому однофазному подходу Гиббса. К сожалению, ОЦ уравнение до сих пор остается незамкнутым, а все использующиеся на практике замыкания, являются аппроксимациями, адекватность которых оценивается эмпирически. Кроме того, существуют области состояний, где у ОЦ уравнения отсутствует единственное решение [17, 18].

Другой распространенный подход – вириальное уравнение состояния (ВУС) – выводится в приближении малой плотности числа частиц как на базе ББГКИ уравнений [19], так и на основе группового разложения конфигурационного интеграла канонического или большого канонического ансамбля Гиббса [1, 16, 20]. Как и любой бесконечный ряд, вириальное разложение для давления может расходиться, и

ПРОБЛЕМА КОНДЕНСАЦИИ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

Ушкац М.В., канд. техн. наук, доцент
Национальный университет кораблестроения
им. адмирала Макарова, Украина

Рассматривается точное выражение для группового разложения конфигурационного интеграла системы взаимодействующих частиц. Исследования этого выражения указывают на начало фазового перехода газ-жидкость в точках сингулярности изотермической сжимаемости. Показано, также, что именно эти точки, а не точки сингулярности самого вириального ряда, являются границей применимости вириального уравнения состояния. В области большой плотности, соответствующей жидкому и твердому состояниям, обнаружена неадекватность группового разложения, связанная с интегрированием в бесконечных пределах, т.е. с независимостью неприводимых интегралов от плотности.

Ключевые слова: конфигурационный интеграл, групповое разложение, вириальное уравнение состояния, неприводимый интеграл, вириальный коэффициент.

Участник конференции, Национального первенства
по научной аналитике, Открытого Европейско-Азиатского
первенства по научной аналитике

это относят к основным недостаткам ВУС наряду со сложностью вычисления вириальных коэффициентов старших порядков.

Нам до сих пор не известны точные границы адекватности ВУС и ОЦ уравнения. Некоторые исследователи предполагают прямую связь между участками фазовых переходов и точками сингулярности вириального ряда [21, 22] или областью расходимости ОЦ уравнения [17, 18], но эти предположения остаются недоказанными.

К настоящему времени в физике успело сложиться устойчивое мнение о том, что классический (однофазный) статистический подход Гиббса применим только вне области фазовых переходов и, в принципе, не может описывать состояние системы внутри этой области. Однако винить в сложившейся ситуации следует, конечно же, недостаточность наших знаний и несовершенство используемого математического аппарата.

Действительно, в случае ОЦ уравнения мы еще просто не знаем его точного замыкания – нам неизвестен точный вид соответствующего бридж-функционала [18] (им заменяют учет бесконечного числа неприводимых схем непрямых корреляций).

В случае ВУС не следует забывать, что вириальное разложение не является точным выражением конфигурационного интеграла – это всего лишь его аппроксимация в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) при малых плотностях $\rho = N/V$.

Существует возможность получить точное выражение группового разложения конфигурационного интеграла Q_N системы N частиц (вывод представлен в работе [23]) через, так называемые, неприводимые групповые интегралы β_k , то есть, по сути, через вириальные коэффициенты $B_{k+1} = -k\beta_k/(k+1)$

$$Q_N = V^N N! F^{(N)}, \quad (1)$$

где $F^{(N)}$ представляет собой коэффициент при y^N в разложении по степеням y следующей функции

$$F(y) = \left(1 - \sum_{k \geq 1} k \frac{\beta_k \rho^k}{N^k} y^k \right) \times \exp \left(y \left[1 - \sum_{k \geq 1} \frac{k}{k+1} \frac{\beta_k \rho^k}{N^k} y^k \right] + N \sum_{k \geq 1} \frac{\beta_k \rho^k}{N^k} y^k \right). \quad (2)$$

Такой способ выражения конфигурационного интеграла является более сложным по сравнению с вириальной аппроксимацией, но зато он не имеет ограничений, характерных для ВУС, за исключением двух упрощений, лежащих в основе самого группового разложения, а именно:

- парная аддитивность потенциала взаимодействия (существуют способы учесть неаддитивность, оставаясь в рамках группового разложения [24]);
- независимость неприводимых интегралов от плотности (упрощение, связанное с интегрированием всех неприводимых графов в бесконечных пределах).

Анализ выражения (1) с учетом функции (2) в термодинамическом пределе позволил прийти к нескольким важным выводам:

Во-первых, ни логарифм конфигурационного интеграла, ни давление не расходятся в точках сингулярности вириального ряда, а, значит, и проблема расходимости вириального разложения может считаться сегодня не имеющей физического смысла.

Во-вторых, было доказано [23], что при учете любого конечного числа неприводимых интегралов (или вириальных коэффициентов) в области температур ниже критической изотермы уравнения (1) полностью совпадают с изотермами вириального уравнения только до точки сингулярности изотермической сжимаемости ($\sum k \beta_k \rho^k = 1$) и принципиально отличаются при больших плотностях – давление, соответствующее уравнению (1) перестает зависеть от плотности.

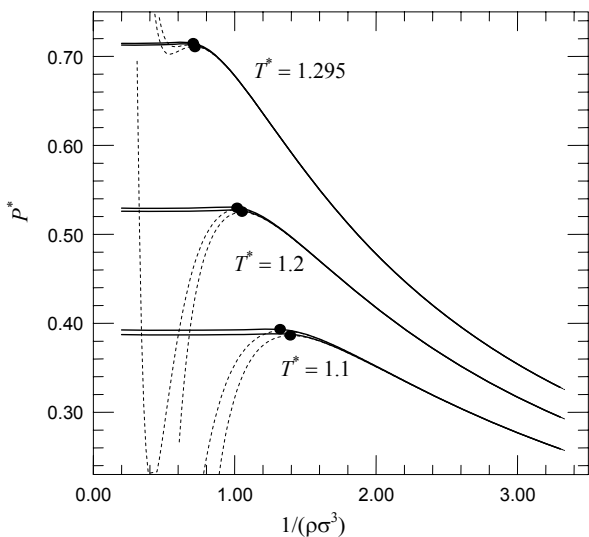


Рис. 1. Изотермы (1) (сплошная линия) и ВУС (пунктир) для трех температур при учете четырех вириальных коэффициентов (верхние кривые в каждой из трех групп) и восьми коэффициентов (нижние кривые) для потенциала Леннард-Джонса. Точками отмечено положение сингулярностей изотермической сжимаемости

Эти же выводы подтверждаются численными исследованиями. На рис. 1 представлены результаты расчетов с помощью ВУС и уравнения (1) ($N = 8000$) давления $P^* = P\sigma^3/\epsilon$ при различных температурах $T^* = kT/\epsilon$ для потенциала Леннард-Джонса (12-6) (ϵ и σ – параметры этого потенциала) с учетом различного числа вириальных коэффициентов (значения B_6 , B_7 и B_8 интерполировались на основании результатов работ [25, 26]).

Постоянство давления указывает на то, что точка сингулярности изотермической сжимаемости должна считаться точкой сухого насыщенного пара, то есть принадлежать бинадали, а не спинодали, как считалось ранее, тем более что вириальное уравнение и не должно описывать метастабильные состояния, принципиально невозможные в рамках статистики Гиббса.

На рис. 2 показаны соответствующие кривые конденсации для различного числа вириальных коэффициентов, а также экспериментальные бинадаль и спинодаль. Эти кривые лежат ближе к спинодали, но с ростом числа учитываемых коэффициентов они заметно приближаются к бинадали. К сожалению, ограниченность числа известных вириальных коэффициентов высших порядков, как и значительная погрешность их значений (особенно для B_7 и B_8), пока не позволяют уверенно экстраполировать положение кривой конденсации, при $k \rightarrow \infty$.

Точное выражение (1) для группового разложения конфигурационного интеграла может описывать начало процесса конденсации, не противоречащее законам термодинамики, но в области очень большой плотности его поведение не соответствует действительности – отсутствуют признаки жидкого и твердого состояний.

Главная причина такой неадекватности может быть заложена в самой сути группового разложения – это интегрирование всех неприводимых схем в бесконечных пре-

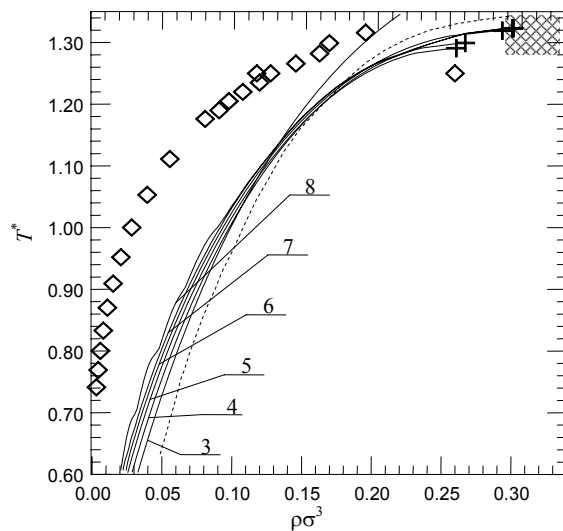


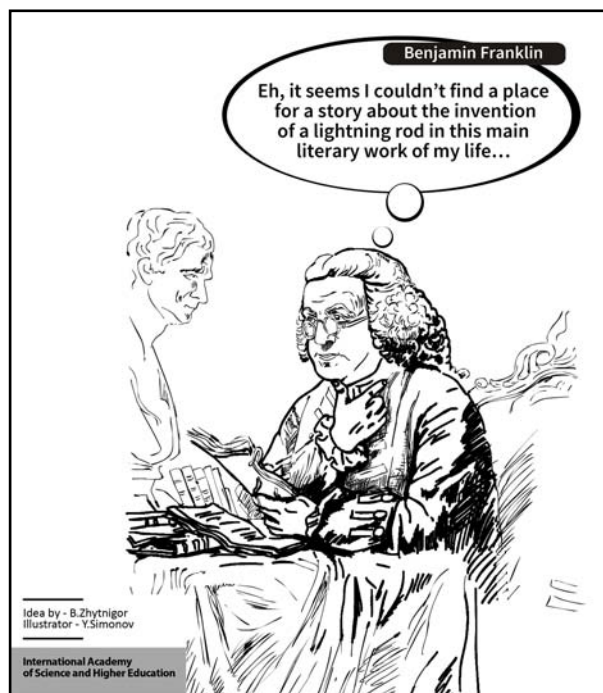
Рис. 2. Кривые конденсации с учетом различного числа вириальных коэффициентов (номера приводятся на рисунке). Символы (+) показывают соответствующие критические точки, символами (◇) обозначены точки бинадали [5], пунктирная кривая соответствует спинодали [8], в заштрихованной прямоугольной области лежат критические параметры, полученные в разных работах [3–9]

делах. При низких температурах все известные на сегодня неприводимые интегралы старших порядков положительны, т.е. учитывают скорее притяжение, а не отталкивание (независимо от плотности!). Поэтому, неудивительно, что учет сил притяжения дает начало процесса конденсации, но отсутствие сил отталкивания в принципе не может остановить этот процесс. Интегрирование в реальных пределах при уменьшении объема должно постепенно уменьшать групповые интегралы и даже менять их знак.

С другой стороны, выводы, сделанные с учетом только первых семи неприводимых интегралов, могут оказаться преждевременными. Возможно, что учет интегралов высших порядков изменит ситуацию. В любом случае, эти вопросы требуют дальнейших серьезных исследований.

References:

1. A. Isihara. Statistical physics (Academic Press, 1971).
2. Andrea Collecchio, Wolfgang König, Peter Mörters and Nadia Sidorova. Phase Transitions For Dilute Particle Systems with Lennard-Jones Potential. Communications in Mathematical Physics. Volume 299, Number 3 (2010), 603-630.
3. Panagiotopoulos A.Z. Molecular simulation of phase coexistence: Finite-size effects and determination of critical parameters for two- and three-dimensional Lennard-Jones fluids. Int. J. Thermophys. Volume 15, Number 6 (1994), 1057-1072.
4. Xiaoli Feng, Zhixin Li and Zengyuan Guo. Monte Carlo simulation of thermodynamic properties for two-dimensional Lennard-Jones fluids. Chinese Science Bulletin. Volume 45, Number 21 (2000), 2004-2009.
5. David A. Kofke. Direct evaluation of phase coexistence by molecular simulation via integration along the saturation line. J. Chem. Phys. 98, 4149 (1993).
6. Phil Attard. Stochastic molecular dynamics: A combined Monte Carlo and molecular dynamics technique for isothermal simulations. J. Chem. Phys. 116, 9616 (2002).
7. J. Karl Johnson, John A. Zollweg, Keith E. Gubbins. The Lennard-Jones equation of state revisited. Mol. Phys. 78, 3 (1993) 591-618.
8. J.J. Nicolas, K.E. Gubbins, W.B. Streett, D.J. Tildesley. Equation of state for the Lennard-Jones fluid. Molecular Physics Vol. 37, Iss. 5, 1979, 1429-1454.
9. Lotfi, J. Vrabec, and J. Fischer. Vapour liquid equilibria of the Lennard-Jones fluid from the NpT plus test particle method. Mol. Phys. 76, 1319 (1992).
10. Tatsuto Kimura, Shigeo Maruyama. Molecular dynamics simulation of heterogeneous nucleation of a liquid droplet on a solid surface. Microscale Thermophysical Engineering. Vol. 6, Iss. 1, 2002, 3-13.
11. Hiroshi Watanabe, Nobuyasu Ito, and Chin-Kun Hu. Phase diagram and universality of the Lennard-Jones gas-liquid system. J. Chem. Phys. 136, 204102 (2012).
12. Van Der Waals, J.D. The equation of state for gases and liquids. Nobel Lectures in Physics: 254–265 (1910).
13. Jiří Kolafa and Ivo Nezbeda. The Lennard-Jones fluid: an accurate analytic and theoretically-based equation of state. Fluid Phase Equilibria 100, 1 – 34 (1994).
14. Maxwell, J.C. The scientific papers of James Clerk Maxwell (Dover Publications, New York, 1965) 424.
15. L.S. Ornstein and F. Zernike, Accidental deviations of density and opalescence at the critical point of a single substance. Proc. Acad. Sci. 17, 793-806 (1914).
16. R. Balescu, Equilibrium and Nonequilibrium Statistical mechanics (John Wiley, New York, 1975).
17. D.A. Tikhonov, G. N. Sarkisov. Singularities of Solution of the Ornstein–Zernike Equation within a Gas–Liquid Transition Region. Russ. J. Phys. Chem. Vol. 74, No. 3, 2000, pp. 470–476.
18. Саркисов Г Н “Приближенные уравнения теории жидкостей в статистической термодинамике классических жидких систем” УФН 169 625–642 (1999).
19. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. – М.; Л.: ОГИЗ. Гос. изд-во техн.-теорет. лит., 1946. – 118 с.
20. Дж. Майер, М. Гепперт-Майер. Статистическая механика. М.: Мир, (1980). 544 с.
21. A.G. Vompe and G.A. Martynov, J. Chem. Phys. 106, 6095 (1997).
22. E.M. Apfelbaum, V.S. Vorob'ev, and G.A. Martynov. Regarding convergence curve of virial expansion for the Lennard-Jones system. J. Chem. Phys. 127, 064507 (2007).
23. M.V. Ushcats. Equation of State Beyond the Radius of Convergence of the Virial Expansion. Phys. Rev. Lett. 109, 040601 (2012).
24. Robert Hellmann and Eckard Bich. A systematic formulation of the virial expansion for nonadditive interaction potentials. J. Chem. Phys. 135, 084117 (2011).
25. A.J. Schultz, D.A. Kofke. Sixth, seventh and eighth virial coefficients of the Lennard-Jones model. Molecular Physics 107, 21, 2309-2318 (2009).
26. Andrew J. Schultz, Nathaniel S. Barlow, Vipin Chaudhary, David A. Kofke. Mayer Sampling Monte Carlo calculation of virial coefficients on graphics processors. Molecular Physics, 1 (2012).



GISAP Championships and Conferences 2014

Branch of science	Dates	Stage	Event name
JULY			
Medicine, Pharmaceutics, Biology, Veterinary Medicine, Agriculture	24.07-29.07	II	Life and social programs of biological organisms' existence quality development
Economics, Management, Law, Sociology, Political and Military sciences	24.07-29.07	II	The power and freedom in the structure of global trends of development of economical and legal systems and management techniques
AUGUST			
Physics, Mathematics, Chemistry, Earth and Space sciences	08.08-13.08	II	Properties of matter in the focus of attention of modern theoretical doctrines
Technical sciences, Architecture and Construction	28.08-02.09	II	Creation as the factor of evolutionary development and the society's aspiration to perfection
SEPTEMBER			
Psychology and Education	17.09-22.09	III	Interpersonal mechanisms of knowledge and experience transfer in the process of public relations development
OCTOBER			
Philology, linguistics	02.10-07.10	III	Problems of combination of individualization and unification in language systems within modern communicative trends
Culturology, Art History, Philosophy and History	16.10-21.10	III	Cultural and historical heritage in the context of a modern outlook formation
NOVEMBER			
Medicine, Pharmaceutics, Biology, Veterinary Medicine, Agriculture	05-11-10.11	III	Techniques of ensuring the duration and quality of biological life at the present stage of the humanity development
Economics, Management, Law, Sociology, Political and Military sciences	20.11-25.11	III	Influence of the social processes globalization factor on the economical and legal development of states and corporations
DECEMBER			
Physics, Mathematics, Chemistry, Earth and Space sciences	04.12-09.12	III	Variety of interaction forms of material objects through a prism of the latest analytical concepts
Technical sciences, Architecture and Construction	18.12-23.12	III	Target and procedural aspects of scientific and technical progress at the beginning of the XXI century





International Academy of Science and Higher Education (IASHE)

1 Kings Avenue, London, N21 1PQ, United Kingdom

Phone: +442032899949

E-mail: office@gisap.eu

Web: <http://gisap.eu>