



Вестник

Московского государственного
областного университета

Библиотека МГОУ
Читальный зал уч.к.2

Серия

**«ФИЗИКА-
МАТЕМАТИКА»**

2 / 2010

МАТЕМАТИКА

УДК 514.76+512.54

ПРОСТРАНСТВА АФФИННОЙ СВЯЗНОСТИ С ОБОБЩЕННЫМ
АЛГЕБРАИЧЕСКИМ СВОЙСТВОМ МУФАНГ

Е.Л. Нестеренко

*Российский университет дружбы народов
117198, ул. Миклухо-Маклая, 6**Московский государственный областной университет
105005, Москва, ул. Радио, 10а*

Аннотация. В настоящей работе вводятся в рассмотрение двусторонние многообразия аффинной связности, дается их алгебраическое описание, выводятся некоторые необходимые дифференциально – геометрические тождества, имеющие место в данном классе пространств. Рассмотрены двусторонние пространства нулевой кривизны, доказываемся, что лупы Муфанг и только они являются геодезическими лупами гладких двусторонних пространств нулевой кривизны. Получено точное алгебраическое описание широкого класса пространств аффинной связности, представляющих определенный научный интерес.

Ключевые слова: геодезические лупы, лупы Муфанг, двусторонние многообразия аффинной связности.

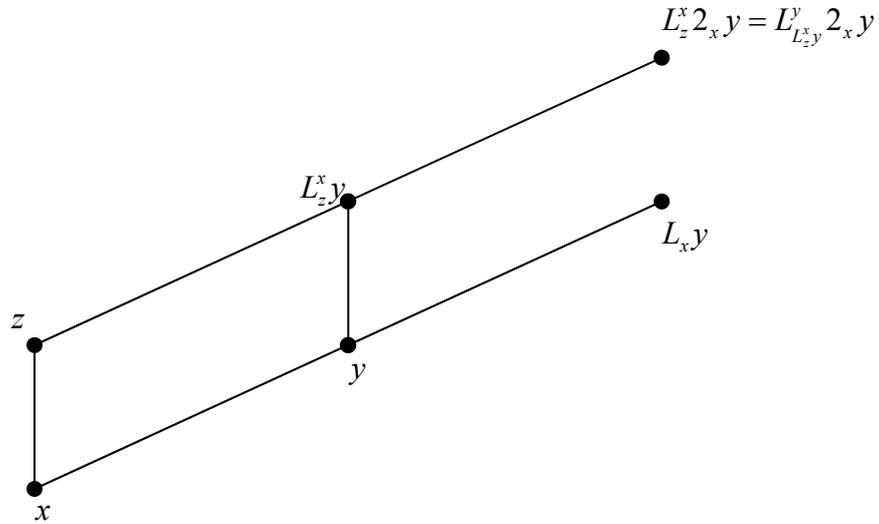
Пусть $\mathcal{M} = \langle M, L, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$ - вещественная левая геоодулярная структура (см. [1]; [2] с. 301, [3]. В работе [4] обсуждается понятие геодезической лупы пространства аффинной связности.) Будем предполагать в дальнейшем, что для любой точки $e \in M, L^e, e \rangle$ есть не только левая, но и правая лупа. Заметим, что в гладком случае это допущение всегда выполняется. Положим $\bar{L}_{xy}^e = L_{yx}^e$ для любых e, x, y из M . Тогда, как легко видеть, для любой точки $e \in M, L^e, te \rangle$ есть одуль над полем вещественных чисел.

Определение: Вещественную левую геоодулярную структуру $\mathcal{M} = \langle M, L, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$ будем называть двусторонней, если $\bar{\mathcal{M}} = \langle M, \bar{L}, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$ есть вещественная левая геоодулярная структура.

Предложение I: Левая геоодулярная структура $\mathcal{M} = \langle M, L, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$ является двусторонней тогда, и только тогда, когда выполняется тождества:

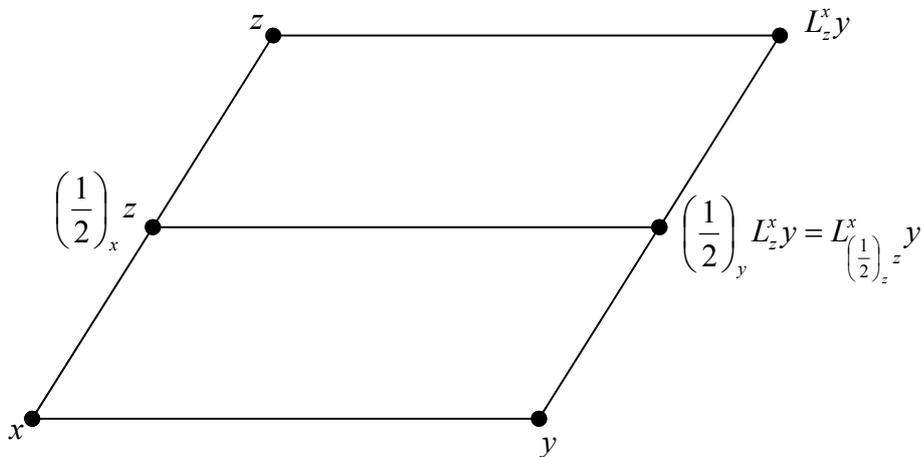
$$L_{L_{zy}^x}^y t_x y = L_{L_{zx}^y}^x t_x y . \quad (1)$$

Можно проиллюстрировать это тождество, рассмотрев частный случай:



$$L_{t,z}^x y = t_y L_z^x y \quad (2)$$

при $t = \frac{1}{2}$



Доказательство: Тождства (1) и (2) равносильны соответственно первому и второму тождествам геоодулярности в $\overline{\mathcal{M}} = \langle M, \bar{L}, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$.

Следующее предложение описывает двусторонние геоодулярные структуры на языке одулей с элементарными голономиями (к-одулей)

Предложение 2: Пусть $\mathcal{M}_e = \langle M, L, t, e \rangle$ - двусторонний одуль, и для любых $x, y \in M$ определены биекции $h(x, y): M \rightarrow M$, удовлетворяющие следующим тождествам:

$$h(e, x)y = y , \tag{3}$$

$$h(x, y)tz = th(x, y)z , \tag{4}$$

$$h(L_x b, L_z h(x, z)b)l(x, b)b = l(z, h(x, z)b)h(x, z)b , \tag{5}$$

$$L_{L_x a}^{-1} L_{L_x t b} h(x, L_x t b)a = t L_{L_x a}^{-1} L_{L_x b} h(x, L_x b)a . \tag{6}$$

где $l(x, y)z = L_{L_x y} L_x L_y z$

Тогда $\langle M, L, t, e, h \rangle$ может быть включен в качестве геодезического h - одуля в двустороннюю геоодулярную структуру. Обратно, любой геодезический h - одуль двусторонней геоодулярной структуры удовлетворяет тождествам (3) – (6).

Из предложения 2 следует

Предложение 3: Двусторонний одуль $\mathcal{M}_e = \langle M, L, t, e \rangle$ может быть включен в качестве геодезического одуля в двустороннюю геоодулярную структуру нулевой кривизны тогда и только тогда, когда выполняются тождества:

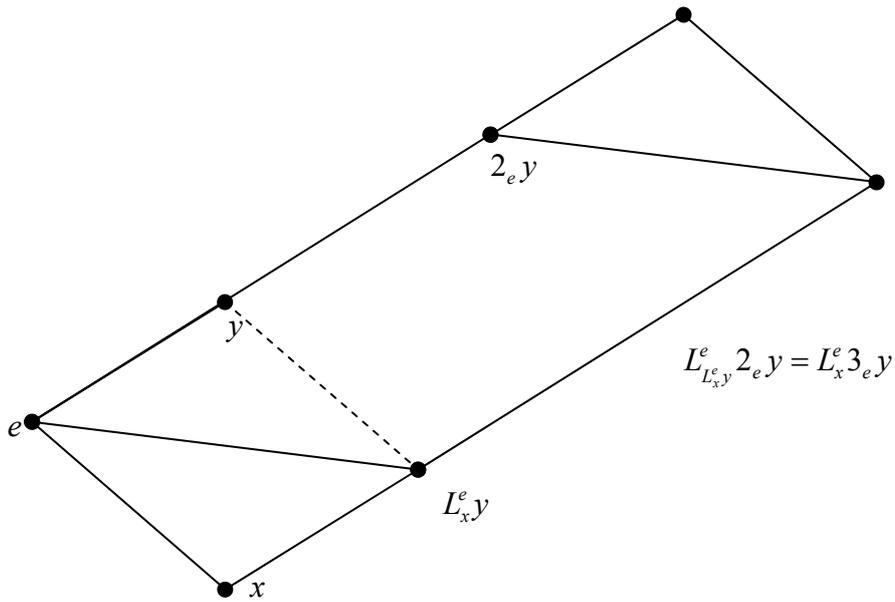
$$l^e(x, y)u_e y = u_e y , \tag{7}$$

$$l^e(x, y) = \left(L_{L_x y}^e \right)^{-1} L_x^e L_y^e ,$$

$$L_x^e L_y^e u_e y = L_{L_x}^e u_e y ,$$

$$L_x^e (u + 1)_e = L_{L_x y}^e u_e y .$$

Положим: $u = 2$



$$\left(L_{L_x^e a}^e\right)^{-1} L_{L_x^e b}^e a = t_e \left(L_{L_x^e}^e\right)^{-1} L_{L_x^e b}^e a . \quad (8)$$

Примечание: $\left(L_{L_x^e}^e\right)^{-1} = L_e^{L_x^e a}$

Очевидно, что групповая связность Э. Картана ([5]) является двусторонней геоодулярной структурой нулевой кривизны. Используя бинарную лиевость лупы Муфанг, нетрудно убедиться в справедливости следующего предложения.

Предложение 4: Пусть одуль $\mathcal{M}_e = \langle M, L, t, e \rangle$ такой, что $\langle M, L, e \rangle$ - лупа Муфанг. Тогда \mathcal{M}_e может быть включен в качестве геодезического одуля в двустороннюю геоодулярную структуру нулевой кривизны.

Согласно предложению 4 мы приходим к геоодулярной структуре, вообще говоря, нулевой кривизны, каждая геодезическая лупа которой есть лупа Муфанг.

Предложение 5: Пусть $\mathcal{M}_e = \langle M, L, t, e \rangle$ - одуль Муфанг.

положим $h(x, L_y x) = l(y, x)$, определим операции L^a и t_a следующими формулами:

$$L_b^a = L_b h(a, b) L_a^{-1} ,$$

$$t_a = L_e t L_a^{-1} .$$

Тогда $\mathcal{M} = \langle M, (L^a)_{a \in M}, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$ - есть двусторонняя геоодулярная структура, каждая геодезическая лупа которой есть лупа Муфанг и выполняется тождество:

$$h^a(x, L_y x) = l^a(y, x) . \quad (9)$$

Теперь приступим к выводу необходимых дифференциально – геометрических тождеств, описывающих гладкие двусторонние геоодулярные многообразия.

Предложение б: В многообразии линейной связности (M, ∇) , соответствующем гладкому двустороннему геоодулярному многообразию $\mathcal{M} = \langle M, L, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$ выполняются тождества

$$R(X, Y)Z = R(Y, Z)X, \quad (10)$$

$$\nabla_z T(X, Y) = \nabla_x T(Y, Z), \quad (11)$$

где R, T - соответственно тензоры кривизны и кручения, X, Y, Z – гладкие векторные поля.

Доказательство: В работе [4] вычислено разложение операции геодезической лупы $\langle L^e, e \rangle$ в нормальной системе координат с центром в точке e с точностью до малых третьего порядка:

$$(L_a^e b)^i = b^i + a^i + T_{jk}^i b^j a^k - \frac{1}{2} (\Gamma_{kj,e}^i - T_{ck}^i T_{je}^c) b^j a^k a^e - \frac{1}{2} \Gamma_{kj,e}^j b^j b^k a^e + o(\rho^3), \quad (12)$$

$\rho = \max \{ |a^i|, |b^i| \}$, $\{ T_{jk}^i \}$ - компоненты тензора кручения в точке e , $\Gamma_{kj,e}^i = \frac{\partial}{\partial x^e} [\Gamma_{kj}^i(x)]_{x=e}$, $\{ \Gamma_{kj}^i \}$ - компоненты линейной связности ∇ .

Аналогично, для операции $\bar{L}_a^e b = L_b^e a$ имеем:

$$(\bar{L}_b^e a)^i = a^i + b^i + \bar{T}_{jk}^i a^j b^k - \frac{1}{2} (\bar{\Gamma}_{kj,e}^i - \bar{T}_{ck}^i \bar{T}_{je}^c) a^j b^k b^e - \frac{1}{2} \bar{\Gamma}_{kj,e}^j a^j a^k b^e + o(\rho^3), \quad (13)$$

где $\{ \bar{T}_{jk}^i \}$ - компоненты тензора кручения \bar{T} аффинной связности $\bar{\nabla}$, соответствующей геоодулярному многообразию $\mathcal{M} = \langle M, L, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$, $\bar{\Gamma}_{kj,e}^i = \frac{\partial}{\partial x^e} [\bar{\Gamma}_{kj}^i(x)]_{x=e}$, $\{ \bar{\Gamma}_{kj}^i \}$ - компоненты линейной связности $\bar{\nabla}$. Т.к. $L_a^e b = \bar{L}_b^e a$, то из равенств (12) и (13) имеем

$$\bar{T}_{jk}^i = -T_{jk}^i, \quad (14)$$

и, следовательно, т.к. $\Gamma_{(jk)}^i = \bar{\Gamma}_{(jk)}^i$, поскольку (M, ∇) и $(M, \bar{\nabla})$ имеют общие геодезические линии, получаем:

$$\Gamma_{jk}^i = \bar{\Gamma}_{jk}^i - T_{jk}^i. \quad (15)$$

Принимая во внимание равенство (15), из соотношений (12) и (13) имеем:

$$\Gamma_{kj,e}^i + \Gamma_{ej,k}^i - T_{\alpha k}^i T_{je}^\alpha - T_{\alpha e}^i T_{jk}^\alpha = \Gamma_{ke,j}^i + \Gamma_{ek,j}^i, \quad (16)$$

$$\Gamma_{ke,j}^i + \Gamma_{ek,j}^i = \Gamma_{kj,e}^i + \Gamma_{ej,k}^i - T_{kj,e}^i - T_{ej,k}^i - T_{\alpha k}^i T_{je}^\alpha - T_{\alpha e}^i T_{jk}^\alpha \quad (17)$$

Складывая соотношения (16) и (17), и приводя подобные члены, немедленно получаем

$$T_{kj,e}^i + T_{ej,k}^i = 0 .$$

В силу нормальности системы координат легко проверить, что

$$\nabla_e T_{kj,e}^i + \nabla_k T_{ej}^i = T_{kj,e}^i + T_{ej,k}^i .$$

Т.о., мы доказали, что $\nabla_e T_{kj,e}^i + \nabla_k T_{ej}^i = 0$, и, следовательно, имеет место тождество(11).

Учитывая, что компоненты тензора кривизны в нормальных координатах вычисляются по формуле

$$R_{mk,e}^i(e) = \Gamma_{me,k}^i - \Gamma_{ke,m}^i + T_{kp}^i T_{me}^p - T_{mp}^i T_{ke}^p ,$$

подставляем в равенство (16) следующие соотношения:

$$\Gamma_{ke,j}^i = \Gamma_{je,k}^i - T_{jp}^i T_{ke}^p + T_{kp}^i T_{je}^p + R_{kj,e}^i$$

$$\Gamma_{ek,j}^i = \Gamma_{jk,e}^i - T_{jp}^i T_{ek}^p + T_{ep}^i T_{jk}^p + R_{ej,k}^i$$

После очевидных сокращений имеем

$$R_{kj,e}^i + R_{ej,k}^i = 0 . \quad (18)$$

Тождество (10) есть инвариантная запись тождества (18).

Предложение 7: Лупы Муфанг, и только они, являются геодезическими лупами двусторонних геоодулярных многообразий нулевой кривизны.

Доказательство: Известно ([3] с. 62), что локальным аналитическим лупам Муфанг соответствует многообразия аффинной связности, удовлетворяющие условиям:

$$R(X, Y)Z = 0, \quad (19)$$

$$\nabla_x T(Y, Z) = \frac{1}{3} [T(X, T(Y, Z)) + T(Y, T(Z, X)) + T(Z, T(X, Y))] . \quad (20)$$

Из тождеств (11), (19) и первого тождества Бианки немедленно следует тождество (20). Применение предложения 4 завершает доказательство.

В заключении отметим, что двусторонние пространства составляют широкий класс. Они имеют непустое пересечение с A -проективно симметрическими пространствами, то есть пространствами, имеющими общие геодезические линии с сохранением канонического (аффинного) параметра с локально симметрическими многообразиями [6; 7].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Сабинин Л.В.* Одули, как новый подход к геометрии со связностью (Докл. АН СССР. 1977. – Т.233. - №5 – с.800 – 803.)
2. *Сабинин Л.В.* Методы неассоциативной алгебры в дифференциальной геометрии. (Кобаяси Ш., Номидзу К. Основы дифференциальной геометрии. Т.1. – М.: Наука. 1981 – с.293 – 339.
3. *Сабинин Л.В., Михеев П.О.* Теория гладких луп Бола. М.: Издательство УДН. 1985 – 81 с.
4. *Аквис М.А.* О геодезических лупах и локальных тройных системах пространств аффинной связности. (Сиб. Матем. ж. – 1978 – Т.19. - №2 – с.243 – 253)
5. *Карпан Э.* Геометрия групп Ли и симметрические пространства, сборник работ. – М.:ИЛ. 1949 – 384 с.
6. *Matveyev O., Nesterenko E.L.* On the quasigroup properties of prosymmetric spaces with zero curvature. Webs and Quasigroups. Tver, 2002, pp. 78-85.
7. *Matveyev O., Nesterenko E.L.* The real prosymmetric spaces. Non – associative algebra and its applications. 2006, V.246, Ch. 19, pp.253-260.

AFFINELY CONNECTED SPACES WITH GENERALIZED ALGEBRAIC MOUFANG PROPERTY

H. Nesterenko

*Peoples' Friendship University of Russia (PFUR)
6, Miklucho-Maklaya str., 117198, Moscow*

*Moscow State Regional University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. In this paper twolateral manifolds of affine connection are introduced, the algebraic description is given, some differential identities of this class of spaces are obtained. Twolateral manifolds of affine connection of zero curvature are discussed, it is proved that Moufang loops, and only them, are geodesic loops of smooth twolateral zero curvature spaces. The precise algebraic description of wide class of affinely connected spaces is obtained. These spaces are of definite scientific interest.

Key words: geodesic loops, Moufang loops, affinely connected spaces.

УДК 512+515.1:007

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ РЕЛЯЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ

О.А. Матвеев

*Московский государственный областной университет
105005, Москва, ул. Радио, 10а*

Аннотация. В статье вводятся в рассмотрение топологические реляционные системы для моделирования различных предметных областей. Проведена формализация процедуры определения типа объектов в пространстве признаков предметной области.

Ключевые слова. Реляционная система, топология, семантический базис, модели.

Введение

Высокая сложность, многообразие функций современных технических, технологических, диагностико – медицинских, экономических, информационно - педагогических систем представляют необходимость учета большого числа факторов, выявления и анализа всех конкурентоспособных вариантов с целью повышения обоснованности принятия промежуточных и окончательных решений. Это особенно важно на начальных этапах разработок. Эффективным подходом к решению этих задач является автоматизация информационного обеспечения проектирования (ИОП), основанная на применении баз данных (БД) и баз знаний (БЗ).

При разработке БД и БЗ важное место занимают вопросы моделирования предметных областей. Под предметной областью понимается совокупность объектов, их свойств и отношений между ними, являющихся частью реального мира и принадлежащих сфере проблемной ориентации разрабатываемой информационной системы.

Таким образом, актуальной задачей автоматизации ИОП различных сложных систем является разработка моделей соответствующих предметных областей.

В настоящее время имеется значительное количество типов моделей данных и их конкретных представителей, в числе которых наиболее перспективными, на наш взгляд, являются реляционные базы данных и базы знаний.

Взаимодействие и взаимосвязь системного подхода, теории множеств и теории категорий, бинарной логики и теории алгебраических систем, теории нечётких множеств, многозначной логики и топологии приводят к обобщенной трактовке типовой модели предметной области, достаточно гибкой и универсальной для описания и детализации разных аспектов многообразия существующих концептуальных реализаций в моделировании.

Синтетический подход к моделированию, состоящий в применении различных мощных математических теорий, приводит и к формированию новых математических объектов, таких, как предлагаемые нами понятия топологической модели и топологической реляционной системы. В то же время поддается осмыслению и описанию на языке топологии такое фундаментальное кибернетическое понятие как семантический базис. Иерархический процесс описания базисных объектов наборами основных признаков с

заданными внутренними ассоциативными и неассоциативными связями приводит к построению класса признаков пространств, наделенных структурой отношений различной арности.

Модель данных определим как упорядоченную тройку $D = \langle Q, P, S \rangle$, где Q - множество имен объектов ПО, P - множество характеристических признаков (свойств, параметров) объектов из Q , S - множество отношений (чётких и/или нечётких) различных арностей, заданных на множествах Q и P . Каждый характеристический признак $P_i \in P$ рассматривается как отображение $P_i: Q \rightarrow V_i$, где V_i - область значений (шкалы) признака P_i , причем для удобства рассмотрения будем считать, что областью определения отображения P_i является всё множество Q .

Рассмотрим понятия: тип объектов и пространство признаков ПО. Будем говорить, что объекты $q_1, q_2 \in Q$ являются объектами одного типа, если q_1 и q_2 не различимы в D посредством множества характеристических признаков P .

Ясно, что свойство объектов принадлежать одному типу есть отношение эквивалентности на Q и, следовательно, определяет некоторое разбиение Q на непересекающиеся подмножества. Проведём теоретико-множественное описание типов объектов. Если $P = \{P_i, i = \overline{1, k}\}$, где $P_i: Q \rightarrow V_i$ - отображения с областью значений V_i , то для любого элемента $v = (v_1, v_2, \dots, v_k)$, принадлежащего декартову произведению $V_1 \times V_2 \times \dots \times V_k$, определим подмножество $U_v \subset Q$ следующей формулой: $U_v = P_1^{-1}(v_1) \cap \dots \cap P_k^{-1}(v_k)$. Из теории множеств следует ([7]), что если $v \neq \bar{v}$, то $U_v \cap U_{\bar{v}} = \emptyset$, и любое подмножество в Q , которое можно описать посредством множества характеристических признаков P , является объединением некоторого числа множеств вида U_v . Таким образом, объекты q_1 и q_2 - одного типа, если существует такое $v \in V_1 \times V_2 \times \dots \times V_k$, что $q_1 \in U_v$ и $q_2 \in U_v$. Если $card(V_i)$ - число элементов в множестве V_i , то общее число типов объектов меньше или равно произведению $\prod_{i=1}^k card(V_i)$. Если число объектов в точности равно $\prod_{i=1}^k card(V_i)$, то признаки P_1, \dots, P_k , являются (объектно) независимыми. Пространство признаков V объектов ПО определим как образ отображения $\bar{P}: Q \rightarrow V_1 \times V_2 \times \dots \times V_k$, где $\bar{P}(q) = (P_1(q), \dots, P_k(q))$. Ясно, что пространство признаков объектов ПО совпадает с $V_1 \times V_2 \times \dots \times V_k$ тогда и только тогда, когда признаки P_1, \dots, P_k - независимы.

Особый интерес представляет частный случай, когда все множества V_i состоят из двух элементов: нуля и единицы. Тогда каждый признак из P можно рассматривать как характеристическую функцию на Q и отождествить каждый признак $P_i \in P$ с некоторым подмножеством $M_i \subset Q$. Введем обозначения $M_i^0 = M_i$, $M_i^1 = Q \setminus M_i$, $1 \leq i \leq k$. Пусть m - некоторое натуральное число меньше или равное 2^k , пусть (i_1, i_2, \dots, i_k) есть его двоичная запись, т.е. $i_j = 0$ или $i_j = 1$ и $m = i_1 \cdot 2^{k-1} + i_2 \cdot 2^{k-2} + \dots + i_{k-1} \cdot 2 + i_k$.

Множество вида $L_m = M_1^{i_1} \cap M_2^{i_2} \cap \dots \cap M_k^{i_k}$ будем называть конституентой ([7], с. 29). Ясно, что общее число различных конституент не превосходит 2^k . В теории множеств доказаны следующие факты:

- а) различные конституенты имеют пустое пересечение;
- б) объединение всех конституент равно Q ;

в) каждое множество M_i равно объединению конститuent, содержащих сомножитель M_i^0 ;

г) каждое непустое множество, образованное из множеств M_1, \dots, M_k при помощи операций объединения, пересечения и вычитания, является объединением некоторого числа конститuent.

Из свойств а) - г) следует, что объекты q_1 и q_2 одного типа, если q_1 и q_2 принадлежат одной конститuentе. Пространство признаков V - суть множество всех конститuent. Если все конститuent не пусты, то признаки P_1, \dots, P_k называются независимыми, и в этом случае пространство признаков имеет мощность 2^k .

Аналогичным образом могут быть введены типы свойств.

Упорядоченную пару (ρ_1, ρ_2) будем назвать конгруенцией реляционной системы $D = \langle Q, P, S \rangle$, если

- а) ρ_1 - отношение эквивалентности на множестве имен объектов
- б) ρ_2 - отношение эквивалентности на множестве характеристических признаков P ,
- в) эквивалентные объекты неразличимы в D посредством множества характеристических признаков P и множества отношений S ,
- г) эквивалентные признаки неразличимы в D посредством множества отношений S .

Из теории реляционных систем следует, что любая конгруенция определяет гомоморфизм реляционной системы D на некоторую реляционную систему $\bar{D} = \langle \bar{Q}, \bar{P}, \bar{S} \rangle$, причем мощность множеств \bar{Q} и \bar{P} меньше мощности соответственно множеств Q и P . Рассмотрение реляционной системы D с точностью до конгруенции соответствует определенной иерархии представления предметной области в нашей модели.

В процессе представления данных о ПО в предложенной форме моделирования подлжит динамическому доопределению следующие факты:

- 1) Новые, принадлежащие данной ПО, объекты, их свойства и новые существенные свойства уже определенных объектов.
- 2) Новые отношения, отражающие взаимосвязи между объектами ПО и их характеристиками.

Некоторые предварительные выводы состоят в следующем:

1. Рассмотрен подход к моделированию предметных областей различных систем на основе реляционных моделей баз данных, обеспечивающий адекватность, максимальную простоту и минимальную избыточность представления предметной области системы в форме реляционной системы.
2. Проведена формализация процедуры определения типа объектов и пространства признаков предметной области, что позволяет проводить автоматизированный анализ зависимости характеристических признаков объектов. Предложенный алгоритм позволяет отбросить ненесущие смысловой нагрузки характеристические признаки объектов, что упрощает без потери информации исходную модель.
3. На основе понятий конгруенции и гомоморфизма реляционной системы определяется иерархия представления предметной области системы в форме реляционной модели.

4. В результате представления информации о предметной области на уровне основных понятий и определения системного подхода получена типовая для широкого класса систем модель данных.
5. Предложенный подход развивает формализацию эвристических процедур в рамках реляционных моделей данных и может быть применен для построения логико – семантических моделей.

§1. Категории топологических реляционных систем и топологических моделей
(основные определения)

В настоящем параграфе вводится в рассмотрение топологические модели и топологические реляционные системы, которые далее обсуждаются с категорной точки зрения.

Определение 1.1. Моделью $\mathcal{M} = \langle M, S \rangle$ характеристики (n_1, n_2, \dots, n_k) называется множество M , на котором заданы отношения $R^{(n_1)}, R^{(n_2)}, \dots, R^{(n_k)}$ соответственно арностей $n_1, n_2, \dots, n_k; R^{(n_i)} \subset M^{n_i}, i = \overline{1, k}$, (т.е. n_i -арное отношение есть некоторое подмножество n_i -той декартовой степени множества M). Множество $S = \{R^{(n_1)}, R^{(n_2)}, \dots, R^{(n_k)}\}$ называется сигнатурой модели \mathcal{M} , число $q = \max_{1 \leq i \leq k} n_i$ будем называть порядком модели \mathcal{M} .

Замечание 1.1. Модели и их морфизмы являются предметом самостоятельной математической теории (см., например, [8]), кибернетические проблемы, связанные с теорией моделей, подробно обсуждаются в работе [10].

Определение 1.2 Реляционной системой характеристики $(l; (n_1, m_1), \dots, (n_k, m_k))$ будем называть упорядоченную тройку $\mathcal{R} = \langle M, P, S \rangle$, где M есть множество, на котором заданы унарные отношения $P_1, P_2, \dots, P_l, P_i \subset M, i = \overline{1, l}$; множество $P = \{P_1, P_2, \dots, P_l\}$ называется множеством признаков реляционной системы \mathcal{R} ; S есть множество отношений различных арностей, заданных на множествах M и P , т.е. $S = \{R^{(n_1, m_1)}, R^{(n_2, m_2)}, \dots, R^{(n_k, m_k)}\}$, где $R^{(n_i, m_i)} \subset M^{n_i} \times P^{m_i}, i = \overline{1, k}$. Число $q = \max_{1 \leq i \leq k} \{n_i, m_i\}$ будем называть порядком реляционной системы \mathcal{R} .

Замечание 1.2. В математической литературе термины «модель» и «реляционная система» синонимичны; введенное же нами понятие реляционной системы, вообще говоря, обобщает понятие модели. Действительно из операций 1.1 и 1.2 следует, что при $P = \emptyset$ (\emptyset - пустое множество) реляционная система \mathcal{R} является моделью. Также ясно, что если в реляционной системе \mathcal{R} все числа m_1, m_2, \dots, m_k равны нулю, то $\langle M, S' \rangle$, где $S' = \{P, S\}$, есть модель. Кроме того, если $\mathcal{R} = \langle M, P, S \rangle$ - реляционная система, то $\langle M, P, S \rangle$ есть модель порядка 1. В связи с этим, изучение моделей первого порядка важно для исследования реляционных систем.

Определение 1.3. Две реляционные системы $\mathcal{R} = \langle M, P, S \rangle$ и $\overline{\mathcal{R}} = \langle \overline{M}, \overline{P}, \overline{S} \rangle$ будем называть однотипными, если существуют биекция $g = P \rightarrow \overline{P}$ и биекция $h: S \rightarrow \overline{S}$, такая, что $h(R^{(n_1, m_1)}) = \overline{R}^{(n_1, m_1)}$. Другими словами, две реляционные системы однотипны,

если у них одинаковое количество признаков, и между множествами отношений S и \bar{S} может быть установлено взаимно однозначное соответствие, при котором арности соответствующих отношений совпадают.

Определение 1.4. Пусть $\mathcal{R} = \langle M, P, S \rangle$ и $\bar{\mathcal{R}} = \langle \bar{M}, \bar{P}, \bar{S} \rangle$ - однотипные реляционные системы, g - биективное отображение множества P на множество \bar{P} , h - биекция множества S на множество \bar{S} , такая что $h(R^{(n_1, m_1)}) = \bar{R}^{(n_1, m_1)}$. Пусть f - отображение множества M в множество \bar{M} . Упорядоченную тройку отображений (f, g, h) будем называть гомоморфизмом реляционной системы \mathcal{R} в реляционную систему $\bar{\mathcal{R}}$, если выполняются следующие два условия:

а) для любого $P_i \in P$, для любого $x \in M$

$$(x \in P_i) \Rightarrow (f(x) \in g(P_i));$$

б) для любого $R^{(n_i, m_i)} \in S$, для любого $y \in M^{n_i} \times P^{m_i}$,

$$y = (y_1, K, y_{n_i}; z_1, K, z_{m_i}) \\ [y \in R^{(n_i, m_i)}] \Rightarrow [(f(y_1), K, f(y_{n_i}), g(z_1), K, g(z_{m_i})) \in h(R^{(n_i, m_i)})]$$

Из определений 1.2 – 1.4 немедленно следует:

Предложение 1.1. Класс однотипных реляционных систем является классом объектов некоторой категории, морфизмами которой служат гомоморфизмы реляционных систем.

Определение 1.5. Две однотипные реляционные системы $\mathcal{R} = \langle M, P, S \rangle$ и $\bar{\mathcal{R}} = \langle \bar{M}, \bar{P}, \bar{S} \rangle$ называются изоморфными, если существуют гомоморфизмы (f, g, h) реляционной системы \mathcal{R} в $\bar{\mathcal{R}}$ и $(\bar{f}, g^{-1}, h^{-1})$ реляционной системы $\bar{\mathcal{R}}$ в \mathcal{R} , такие что $\bar{f} \circ f$ - тождественное отображение на M .

Замечание 1.3. Существует естественный функтор вложения категории моделей в категорию реляционных систем, т.о., можно считать категорию моделей полной подкатегорией категории реляционных систем. С другой стороны, такие понятия теории моделей как подмодель, наименьший гомоморфный образ, конгруенция и т.д. очевидным образом обобщаются в соответствующие понятия для реляционных систем.

Определение 1.6. Топологической моделью $T\mathcal{M} = \langle X, U \rangle$ характеристики (n_1, K, n_k) будем называть топологическое пространство X и множество $U = \{r^{(n_1)}, K, r^{(n_k)}\}$, где $r^{(n_i)} (i = \overline{1, k})$ есть непрерывное отображение $r^{(n_i)}: X^{n_i} \rightarrow V_i$, V_i - некоторое топологическое пространство. Число $q = \max_{1 \leq i \leq k} n_i$; будем называть порядком топологической модели $T\mathcal{M}$.

Определение 1.7. Топологической реляционной системой характеристики $(l; (n_1, m_1), K, (n_k, m_k))$ будем называть упорядоченную тройку $T\mathcal{R} = \langle X, W, U \rangle$, где X есть топологическое пространство, на котором заданы непрерывные отображения W_1, W_2, K, W_l , $W_i: X \rightarrow Z_i$; $Z_i (i = \overline{1, l})$ - некоторое топологическое пространство, $W = \{W_1, K, W_l\}$, U - множество отображений $U = \{U^{(n_1, m_1)}, K, U^{(n_k, m_k)}\}$, причем, отобра-

жение $U^{(n_i, m_i)} : X^{n_i} \times W^{m_i} \rightarrow V_i$ таково, что V_i есть топологическое пространство, X^{n_i} - декартова степень топологического пространства X , наделенного тихоновской топологией, и при любом фиксированном $W \in W^{m_i}$ отображение $f_i : X^{n_i} \rightarrow V_i$, $f(x) = U^{(n_i, m_i)}(x, w)$ есть непрерывное отображение. Число $q = \max_{1 \leq k \leq k} \{n_i, m_i\}$ будем называть порядком топологической реляционной системы $T\mathcal{A}$.

Определение 1.8. Пусть $T\mathcal{M} = \langle X, U \rangle$ и $\overline{T\mathcal{M}} = \langle \overline{X}, \overline{U} \rangle$ две топологические модели одной и той же характеристики (n_1, \mathbf{K}, n_k) , $U = \{r^{(n_1)}, \mathbf{K}, r^{(n_k)}\}$, где $r^{(n_i)} : X^{n_i} \rightarrow V_i (i = \overline{1, k})$, $\overline{U} = \{\overline{r}^{(n_1)}, \mathbf{K}, \overline{r}^{(n_k)}\}$, где $\overline{r}^{(n_i)} : \overline{X}^{n_i} \rightarrow \overline{V}_i$. Будем говорить, что $T\mathcal{M}$ и $\overline{T\mathcal{M}}$ однотипны, если существует гомеоморфизмы $f_i : V_i \rightarrow \overline{V}_i (i = \overline{1, k})$.

Определение 1.9. Пусть $T\mathcal{A} = \langle X, W, U \rangle$ и $\overline{T\mathcal{A}} = \langle \overline{X}, \overline{W}, \overline{U} \rangle$ - две топологические реляционные системы. Характеристики

$$(l; (n_1, m_1), \mathbf{K}, (n_k, m_k)); W = \{W_1, \mathbf{K}, W_l\},$$

где $W_i : X \rightarrow Z_i (i = \overline{1, l})$; $U = \{U^{(n_1, m_1)}, \mathbf{K}, U^{(n_k, m_k)}\}$, $U^{(n_i, m_i)} : X^{n_i} \times W^{m_i} \rightarrow V_i (i = \overline{1, k})$,

$$\overline{W} = \{\overline{W}_1, \mathbf{K}, \overline{W}_l\},$$

где $\overline{W}_i : \overline{X} \rightarrow \overline{Z}_i$ $\overline{U} = \{\overline{U}^{(n_1, m_1)}, \mathbf{K}, \overline{U}^{(n_k, m_k)}\}$, $\overline{U}^{(n_i, m_i)} : (\overline{X})^{n_i} \times (\overline{W})^{m_i} \rightarrow \overline{V}_i (i = \overline{1, k})$.

Будем говорить, что $T\mathcal{A}$ и $\overline{T\mathcal{A}}$ однотипны, если существуют гомеоморфизмы $f_i : V_i \rightarrow \overline{V}_i (i = \overline{1, k})$ и гомеоморфизмы $g_j : Z_j \rightarrow \overline{Z}_j (j = \overline{1, l})$.

Определение 1.10. Пусть $T\mathcal{M}$ и $\overline{T\mathcal{M}}$ - две однотипные топологические модели. $T\mathcal{M} = \langle X, U \rangle$, $U = \{r^{(n_1)}, \mathbf{K}, r^{(n_k)}\}$, $r^{(n_i)} : X^{n_i} \rightarrow V_i$, $(i = \overline{1, k})$; $\overline{T\mathcal{M}} = \langle \overline{X}, \overline{U} \rangle$, $\overline{U} = \{\overline{r}^{(n_1)}, \mathbf{K}, \overline{r}^{(n_k)}\}$, $\overline{r}^{(n_i)} : (\overline{X})^{n_i} \rightarrow \overline{V}_i (i = \overline{1, k})$; отображения $f_i : V_i \rightarrow \overline{V}_i (i = \overline{1, k})$ есть гомеоморфизмы. Упорядоченный набор отображений $(g; f_1, \mathbf{K}, f_k)$ будем называть гомоморфизмом топологической модели $T\mathcal{M}$ в $\overline{T\mathcal{M}}$, если g есть непрерывное отображение топологического пространства X в топологическое пространство \overline{X} , такое что для любого $i (i = \overline{1, k})$ коммутативна диаграмма:

$$\begin{array}{ccc} X^{n_i} & \xrightarrow{g^{n_i}} & (\overline{X})^{n_i} \\ \downarrow r^{(n_i)} & & \downarrow \overline{r}^{(n_i)} \\ V_i & \xrightarrow{f_i} & \overline{V}_i \end{array}$$

где $g^{n_i}(y) = (g(y_1), g(y_2), \mathbf{K}, g(y_{n_i}))$, $y \in X^{n_i}$

Определение 1.11. Пусть $T\mathcal{A} = \langle X, W, U \rangle$ и $\overline{T\mathcal{A}} = \langle \overline{X}, \overline{W}, \overline{U} \rangle$ - две однотипные топологические реляционные системы. $W = \{W_1, \mathbf{K}, W_l\}$, где $W_i : X \rightarrow Z_i (i = \overline{1, l})$, $U = \{U^{(n_1, m_1)}, \mathbf{K}, U^{(n_k, m_k)}\}$, $U^{(n_j, m_j)} : X^{n_j} \times W^{m_j} \rightarrow V_j (j = \overline{1, k})$;

$\bar{W} = \{\bar{W}_1, \mathbb{K}, \bar{W}_l\}$, где $\bar{W}_i : \bar{X} \rightarrow \bar{Z}_i; (i = \overline{1, l})$, $\bar{U} = \{\bar{U}^{(n_1, m_1)}, \mathbb{K}, \bar{U}^{(n_k, m_k)}\}$, где $\bar{U}^{(n_j, m_j)} : (\bar{X})^{n_j} \times \bar{W}^{m_j} \rightarrow V_j (j = \overline{1, k})$, отображения $f_i : V_i \rightarrow \bar{V}_i (i = \overline{1, k})$, $g_j : Z_j \rightarrow \bar{Z}_j (g = \overline{1, l})$, есть гомеоморфизмы топологических пространств $V_i, \bar{V}_i (i = \overline{1, k})$ и $Z_j, \bar{Z}_j (j = \overline{1, l})$. Упорядоченный набор отображений $(h; f_1, \mathbb{K}, f_k; g_1, \mathbb{K}, g_l)$ будем называть гомоморфизмом топологической реляционной системы $T\mathcal{R}$ в топологическую реляционную систему $\bar{T}\mathcal{R}$, если для любых $j (j = \overline{1, k})$ и $i (i = \overline{1, l})$ коммутативны диаграммы:

$$\begin{array}{ccc}
 X^{n_j} \times W^{m_j} & \xrightarrow{h^{n_j} \times \alpha_j} & (X)^{n_j} \times W^{m_j} & X & \xrightarrow{h} & \bar{X} \\
 \downarrow U^{(n_j, m_j)} & & \downarrow \bar{U}^{(n_j, m_j)} & \downarrow W_i & & \downarrow \bar{W}_i \\
 V_j & \xrightarrow{f_j} & \bar{V}_j & Z_i & \xrightarrow{g_i} & \bar{Z}_i
 \end{array}$$

где $h^{n_j}(y) = (h(y_1), h(y_2), \mathbb{K}, h(y_{n_j}))$, $y \in X^{n_j}$;

α_j - взаимно однозначное соответствие: $\alpha_j : W^{m_j} \rightarrow \bar{W}^{m_j}$,

h - непрерывное отображение топологического пространства X в топологическое пространство \bar{X} .

Непосредственным следствием определений 1.2 – 1.11 являются предложения 1.2 и 1.3.

Предложение 1.2. Категория одноптипных реляционных систем характеристики $(l; (n_1, m_1), \mathbb{K}, (n_k, m_k))$ является полной подкатегорией категории одноптипных топологических реляционных систем, морфизмами которой служат гомоморфизмы одноптипных топологических систем.

Предложение 1.3. Категория одноптипных топологических моделей характеристики (n_1, \mathbb{K}, n_k) является полной подкатегорией категории одноптипных топологических реляционных систем характеристики $(0; (n_1, 0), \mathbb{K}, (n_k, 0))$.

§2. Топологические модели первого порядка

В настоящем параграфе рассматривается конструкция введения инициальной топологии на некотором множестве X , на котором заданы отображения $U_i : X \rightarrow Z_i, i = \overline{1, l}$, где Z_i есть некоторые топологические пространства. В результате путем, естественным для приложений, приходим к топологической модели первого порядка. Далее обсуждается связь семантики и структуры топологии в топологической модели первого порядка. Заметим, что понятия топологической модели первого порядка и топологической реляционной системы первого порядка совпадают.

Пусть X есть некоторое множество, на котором заданы отображения $U_i : X \rightarrow Z_i, i = \overline{1, l}$, где Z_i есть некоторое топологическое пространство (на практике обычно Z_i есть некоторое открытое или замкнутое подмножество в n_i - мерном векторном про-

пространстве R^{n_i} , причем в Z_i топология τ_i индуцируется стандартной топологией в R^{n_i} . Построим на множестве X начальную топологию, порожденную семейством отображений U_i .

Обозначим через σ_i прообраз семейства τ_i при отображении U_i . Тогда, приняв в качестве предбазы топологии в X объединение всех семейств σ_i , получим в X некоторую топологию σ , причем справедливо следующее

Предложение 2.1. Топология σ в X является слабой из всех таких топологий в X , при которых все отображения U_i ($i = \overline{1, l}$), непрерывны.

Предложение 2.2. $T\mathcal{M} = \langle X, U \rangle$ является топологической моделью первого порядка.

Определение 2.1. Пусть $T\mathcal{M} = \langle X, U \rangle$ - топологическая модель первого порядка, $U = \{U_1, K, U_l\}$, $U_i: (i = \overline{1, l})$ есть непрерывное отображение топологического пространства X в топологическое пространство Z_i . Пусть Z есть декартово произведение топологических пространств Z_i , $Z = Z_1 \times Z_2 \times K \times Z_l$. Наделим Z тихоновской топологией. Определим отображение $F = U_1 \times K \times U_l$, $F: X \rightarrow Z$.

Подмножество $P = imF \subset Z$ с индуцированной топологией будем называть признаковым пространством топологической модели $T\mathcal{M}$.

Пусть $x: P \rightarrow Z$ есть вложение топологического пространства P в топологическое пространство Z , $\lambda_i: Z = Z_1 \times K \times Z_l \rightarrow Z_i$ ($i = \overline{1, l}$) - проекция на i -тый сомножитель. Определим отображения $f_i: P \rightarrow Z_i$, $f_i = \lambda_i \circ x$, тогда приходим к следующему предложению.

Предложение 2.3. $(T\mathcal{M})' = \langle P, f \rangle$, где P - признаковое пространство топологической модели $T\mathcal{M}$, $f = \{f_1, f_2, K, f_l\}$, $f_i = \lambda_i \circ x$, $f_i: P \rightarrow Z_i$, является топологической моделью первого порядка.

Доказательство: из определения 2.1. следует, что для любого i отображение f_i непрерывно, как композиция непрерывных отображений.

Из определения 2.1 и предложения 2.3 следует

Предложение 2.4. Пусть $T\mathcal{M} = \langle X, U \rangle$ - топологическая модель первого порядка $(T\mathcal{M})' = \langle P, f \rangle$; тогда упорядоченный набор отображений $(F, (id)_1, K, (id)_l)$, где $F: X \rightarrow P$, $(id)_i: Z_i \rightarrow Z_i$ - тождественные отображения является гомоморфизмом топологической модели первого порядка $T\mathcal{M}$ в топологическую модель первого порядка $(T\mathcal{M})'$.

Нетрудно убедиться в справедливости следующего предложения.

Предложение 2.5. Топологическая модель первого порядка $(T\mathcal{M})'$ изоморфна топологической модели первого порядка $((T\mathcal{M})')'$.

Определение 2.2. Пусть $T\mathcal{M} = \langle X, U \rangle$ - топологическая модель первого порядка, P - ее признаковое пространство, отображение $F: X \rightarrow P$ построено как в определении 2.1. Для любого элемента p из признакового пространства P обозначим

$A(p) = (F)^{-1}(p)$, тогда $A(p)$ есть некоторое подмножество в X . Множество $SB = \{A(p)\}_{p \in P}$ будем называть семантическим базисом топологической модели первого порядка $T\mathcal{M}$. Будем говорить, что два элемента x_1 и x_2 из множества X принадлежат одному типу, если $F(x_1) = F(x_2)$ или $x_1 \in \left(X \setminus \left(\bigcup_{p \in P} A(p) \right) \right) = A_0$ и $x_2 \in \left(X \setminus \left(\bigcup_{p \in P} A(p) \right) \right) = A_0$.

Предложение 2.6. Отношение принадлежности одному типу есть отношение эквивалентности на множестве X .

Предложение 2.7. Элементы семантического базиса являются замкнутыми подмножествами в топологическом пространстве X , если топология в признаковом пространстве хаусдорфова. Более того, если на множестве X топология введена так, как в предложении 2.1., то элементы семантического базиса являются минимальными замкнутыми подмножествами в X .

Роль семантического базиса в топологической модели первого порядка проясняется следующим предложением.

Предложение 2.8. Пусть $T\mathcal{M} = \langle X, U \rangle$ - топологическая модель первого порядка. Любое непустое подмножество в X , которое можно описать с помощью теоретико – множественных операций посредством множества признаков $U_1, U_2, \dots, U_l, U_i \in U$, является объединением некоторого числа элементов семантического базиса и открытого множества $A_0 = X \setminus \bigcup_{p \in P} A(p)$, где P - признаковое пространство.

В заключение отметим, что конструкция, изложенная в настоящем параграфе, может быть обобщена на топологические реляционные системы n - го порядка, причем понятия признакового пространства и семантического базиса строятся индуктивно, что хорошо согласуется с иерархическим представлением ассоциативных и неассоциативных связей в информационной среде.

ЛИТЕРАТУРА

1. Биркгоф Г., Барти Т. Современная прикладная алгебра. – М.: Мир, 1976. – 400 с.
2. Бусленко Н.П. Моделирование сложных систем. - М.: Наука, 1978. – 399с.
3. Еришов Ю.Л., Палютин Е.А. Математическая логика. – М.: Наука, 1979. - 320с.
4. Кейслер Г.Д. Теория моделей. – М.: Мир, 1977. – 614с.
5. Кейслер Г.Д., Чен Чень –Чунь. Теория непрерывных моделей. - М.: Мир, 1971. – 184 с.
6. Кофман А. Введение в теорию нечетных множеств. – М.: Радио и связь, 1982. – 432с.
7. Куратовский К., Мостовский А. Теория множеств. М.: Мир, 1970. – 416 с.
8. Мальцев А.И. Алгебраические системы. – М.: Наука, 1970. – 392 с.
9. Норберт В. Кибернетика. – М.: Наука, 1983. – 340 с.
10. Шрейдер Ю.А., Шаров А.А. Системы и модели. – М.: Радио и связь, 1982. – 151 с.
11. Грехем Р., Л., Кнут Д. Э., Паташник О. Конкретная математика. Математические основы информатики. М.: ООО «И.Д. Вильямс», 2010 -784 с.

12. *Матвеев О.А., Панишина А.В., Бочаров В.Е.* О топологических реляционных системах. // *Материалы XI конференции молодых ученых*, М.: УДН, 1988, с. 110-121. Деп. в ВИНТИ № 5305 –В88.

TOPOLOGICAL RELATIONAL SYSTEMS

O. Matveyev

*Moscow State Regional University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. In this paper the topological relational systems for a modeling different subject fields are introduced. The formalization procedure for the determination of the type of an object in the subject field indication space is taken.

Key words: relation system, topology, semantic basis, models.

УДК 514.76/+512.54

О ЛОКАЛЬНО ИНВАРИАНТНЫХ ПРОСТРАНСТВАХ АФФИННОЙ СВЯЗНОСТИ

О.А. Матвеев,* Е.Л. Нестеренко**

** Московский государственный областной университет
105005, Москва, ул. Радио, 10а*

*** Российский университет дружбы народов
117198, ул. Миклухо-Маклая, 6*

Аннотация: В настоящей статье выводятся необходимые и достаточные алгебраические условия, описывающие широкий класс локально инвариантных многообразий аффинной связности. Отдельно рассмотрены случаи локальной инвариантности аффинно – связного пространства относительно редуктивного и симметрического пространств.

Ключевые слова: аффинная связность, локальная инвариантность, редуктивное пространство, почти симметрическое пространство, квазигруппа.

Введение

Развитие геометрии от Эрлангенской программы Феликса Клейна и работ Софуса Ли, труды Эли Картана по симметрическим пространствам и теории связностей и, наконец, теория связностей в расслоениях выявили фундаментальную роль, которую играет понятие группы в геометрии. Современные исследования показывают, что не меньшее значение в геометрии имеют и неассоциативные алгебраические объекты, такие как квазигруппы, лупы, одуль, геоодулярные структуры. ([11],-[12], [26], [27]). Гладкое локальное геоодулярное пространство есть точный алгебраический эквивалент многообразия аффинной связности. Систематическое построение теории геоодулярных пространств было произведено в школе профессора Л.В. Сабинина.

Симметрические пространства, введенные Эли Картаном ([13], [14]), обладают математически красивыми алгебраическими свойствами, геодезические симметрии относительно каждой точки являются локальными изоморфизмами аффинной связности. Известно [16], что локально симметрическое пространство может рассматриваться, как гладкая локально идемпотентная леводистрибутивная квазигруппа с «тождеством ключей». Левые сдвиги этой квазигруппы и есть геодезические симметрии. Позднее этот результат был обобщен. Произвольному пространству аффинной связности можно сопоставить однопараметрическое семейство локальных идемпотентных эластичных квазигрупп, определяемых каноническим (аффинным) параметром вдоль геодезических линий. Было введено новое понятие – пространство с геодезическими, как алгебра с однопараметрическим семейством бинарных операций, связанных определенными тождествами. Было установлено взаимно однозначное соответствие между гладкими многообразиями с геодезическими и аффинно связными многообразиями с нулевым тензором кручения. Таким образом, был построен алгебраический эквивалент экспоненциального отображения [17].

В конце прошлого и начале текущего столетия произошли качественные изменения в научном направлении «Нелинейной геометрической алгебры», возникшем на стыке дифференциальной геометрии и теории квазигрупп [1, 3, 6, 7, 9, 11, 12, 18-25].

В связи с проблемой характеристики аффинной связности, допускающей транзитивную группу аффинных преобразований. Было введено понятие локальной инвариантности аффинной связности по отношению к другой аффинной связности. Было установлено, что однородность и инвариантность являются близкими терминами [2, 5, 8, 10].

В этой статье используются некоторые результаты теории геоодулярных пространств и многообразий аффинной связности ([11, 12, 18, 26, 27]), в частности теорема об эквивалентности категории гладких многообразий аффинной связности и категории гладких локальных геоодулярных многообразий. С целью сокращения выкладок здесь мы рассмотрим лишь локальную инвариантность геоодулярного многообразия \mathcal{M} относительно геоодулярного многообразия $\overline{\mathcal{M}}$ в случае, когда \mathcal{M} и $\overline{\mathcal{M}}$ имеют общие геодезические линии с сохранением канонического параметра.

Целью настоящего исследования является нахождение необходимых и достаточных алгебраических условий на геодезический одуль локально инвариантного геоодулярного пространства. Рассматриваемые тождества имеют локальный характер и выполняются, когда левая и правая их части одновременно имеют смысл.

Все геоодулярные многообразия рассматриваются над полем вещественных чисел.

Предварительные результаты

Определение 1. Пусть ∇ и $\overline{\nabla}$ - две аффинные связности, заданные на дифференцируемом многообразии M . Аффинная связность ∇ называется локально – инвариантной относительно аффинной связности $\overline{\nabla}$, если тензорные поля кривизны R и кручения T аффинной связности ∇ , а так же их последовательные ковариантные дифференциалы $\nabla^e R$ и $\nabla^e T$, $1 \leq e < \infty$, параллельны относительно $\overline{\nabla}$:

$$\overline{\nabla}R = 0, \quad \overline{\nabla}T = 0, \quad \overline{\nabla}(\nabla^e R) = 0, \quad \overline{\nabla}(\nabla^e T) = 0.$$

Молино (1964) получил следующий результат (см. также Кобаяси, Номидзу [15], т. II, примечание 25).

Теорема 1. Если аналитическая аффинная связность ∇ на вещественном аналитическом многообразии M локально инвариантна относительно другой аффинной связности, то (M, ∇) локально изоморфно однородному пространству с некоторой инвариантной аффинной связностью.

Обобщая результаты Амброуза, Зингера [2] (1958), где выведены необходимые и достаточные условия для того, чтобы полная риманова связность на односвязном многообразии допускала транзитивную группу преобразований, и, используя работы Кобаяси (1955), Номидзу [10] (1964), (см. также Кобаяси, Номидзу [15], т. II, гл. 10, §§1-2). Костант [5] (1960) вводит понятие жесткости аффинной связности относительно другой аффинной связности.

Определение 2. Пусть ∇ и $\bar{\nabla}$ - две аффинные связности на дифференцируемом многообразии M , и пусть S - тензорное поле на M типа $(1, 2)$: $S(X, Y) = \bar{\nabla}_X Y - \nabla_X Y$, X, Y - дифференцируемые векторные поля на M . Аффинная связность ∇ называется жесткой относительно $\bar{\nabla}$, если S параллельно относительно $\bar{\nabla}$: $\bar{\nabla} S = 0$.

Костант получил следующие теоремы 2 и 3, характеризующие инвариантные аффинные связности на редуктивных однородных пространствах.

Теорема 2. Пусть ∇ - аффинная связность на односвязном многообразии M . Тогда M - редуктивное однородное пространство связной группы Ли с ∇ в качестве инвариантной аффинной связности в том и только том случае, когда существует аффинная связность $\bar{\nabla}$ на M такая, что:

(1) тензорные поля кривизны R и кручения T аффинной связности ∇ ковариантно постоянны относительно $\bar{\nabla}$: $\bar{\nabla} T = 0$, $\bar{\nabla} R = 0$;

(2) ∇ жесткая относительно $\bar{\nabla}$;

(3) $\bar{\nabla}$ полная.

Теорема 3. Пусть ∇ - Аффинная связность на односвязном многообразии M . Тогда M - редуктивное однородное пространство связной группы Ли с ∇ в качестве инвариантной аффинной связности в том и только в том случае, когда существует аффинная связность на M такая, что: (1) $\bar{\nabla}$ инвариантна при параллелизме; (2) ∇ жесткая относительно $\bar{\nabla}$; (3) $\bar{\nabla}$ полная.

Заметим, что из условий (1), (2) теоремы 2, также как из условий (1), (2) теоремы 3 следует, в силу определения 1, что аффинная связность ∇ локально инвариантна относительно $\bar{\nabla}$, и результат Костанта есть важный специальный случай конструкции Молино.

Инвариантные связности на редуктивных однородных пространствах независимо изучались Рашевским (1951), Куритой (1953), Винбергом (1959-1960)

Алгебраическое описание локально инвариантных пространств аффинной связности

Определение 1: Пусть $\mathcal{M} = \langle M, L, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$ и $\overline{\mathcal{M}} = \langle M, \overline{L}, (\overline{\omega}_t)_{t \in R} \rangle$ - два C^k - гладких ($k \geq 0$) локальных геоодулярных многообразия, имеющих общие геодезические линии с сохранением канонического параметра, т.е. $\overline{\omega}_t = \omega_t$. Будем говорить, что \mathcal{M} локально инвариантно относительно $\overline{\mathcal{M}}$, если левые сдвиги $\overline{L}_b^a \cdot a, b \in M$, геоодулярного многообразия $\overline{\mathcal{M}}$ являются локальными изоморфизмами геоодулярного многообразия \mathcal{M} , т.е. выполняется следующее соотношение (когда одновременно имеют смысл правые и левые части равенства):

$$\overline{L}_b^a \circ L_y^x = L_{\overline{L}_b^a}^{L_b^x} \circ \overline{L}_b^a, \quad (1)$$

$$\overline{L}_b^a(t_{x,y}) = t_{\overline{L}_b^a} \overline{L}_b^a y, \quad (2)$$

где $t_{x,y} = \omega_t(x, y)$; $x, y \in M$.

Предложение 1: Пусть ∇ и $\overline{\nabla}$ - аффинные связности на вещественном аналитическом многообразии M , имеющие общие геодезические линии с сохранением канонического параметра, и ∇ - аналитична. Пусть $\mathcal{M} = \langle M, L, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$ и $\overline{\mathcal{M}} = \langle M, \overline{L}, (\overline{\omega}_t)_{t \in R} \rangle$ - локальные геоодулярные многообразия, соответствующие этим аффинным связностям. Тогда ∇ локально инвариантна относительно $\overline{\nabla}$, если и только если \mathcal{M} локально инвариантна относительно $\overline{\mathcal{M}}$.

Доказательство: Аффинные связности ∇ и $\overline{\nabla}$, заданные на многообразии M имеют общие геодезические линии с сохранением канонического параметра тогда и только тогда, когда экспоненциальное отображение $Exp : T(M) \rightarrow M$ в (M, ∇) совпадает с экспоненциальным отображением $\overline{Exp} : T(M) \rightarrow M$ в $(M, \overline{\nabla})$: $Exp = \overline{Exp}$. Пусть аналитическая аффинная связность ∇ локально инвариантна относительно аффинной связности $\overline{\nabla}$. Тогда выполняются соотношения (1) и, следовательно, параллельный перенос $\overline{\tau}_b^a$ вдоль геодезической, соединяющей точки a и b , в $(M, \overline{\nabla})$ отображает тензоры $(\nabla^m T)_a$ и $(\nabla^m R)_a$ в тензоры $(\nabla^m T)_b$ и $(\nabla^m R)_b$ соответственно для $0 \leq m < \infty$.

Применяя теорему (7.2. гл. VI из [15], т.1), получаем, что $\overline{L}_b^a = Exp_b \circ \overline{\tau}_b^a \circ (Exp_a)^{-1}$ ($\overline{Exp} = Exp$) есть локальный аффинный изоморфизм связности ∇ , т.е. индуцированное отображение $(\overline{L}_b^a)_* : T(M) \rightarrow T(M)$ отображает каждое параллельное векторное поле вдоль каждой кривой γ в (M, ∇) в параллельное векторное поле в (M, ∇) вдоль кривой $L_b^a(\gamma)$ и, следовательно, \overline{L}_b^a отображает каждую геодезическую в (M, ∇) в геодезическую в (M, ∇) вместе с ее каноническим параметром. Т.о, имеем:

$$\begin{aligned} \bar{L}_b^a \circ \text{Exp}_x &= \text{Exp}_{\bar{L}_b^a} \circ \left(\bar{L}_b^a \right)_{*,x}; \quad \left(\bar{L}_b^a \right)_{*,y} \circ \tau_y^x = \tau_{\bar{L}_b^a}^{\bar{L}_b^a x} \circ \left(\bar{L}_b^a \right)_{*,x}; \\ \bar{L}_b^a \left(\omega_t(x, y) \right) &= \bar{L}_b^a \left(\text{Exp}_x \left(t \left(\text{Exp}_x \right)^{-1} y \right) \right) = \text{Exp}_{\bar{L}_b^a} \left(\left(\bar{L}_b^a \right)_{*,x} \left(t \left(\text{Exp}_x \right)^{-1} y \right) \right) = \\ \text{Exp}_{\bar{L}_b^a} \left(t \left(\text{Exp}_{\bar{L}_b^a} \right)^{-1} \left(\bar{L}_b^a y \right) \right) &= \omega_t \left(\bar{L}_b^a x, \bar{L}_b^a y \right); \\ \bar{L}_b^a \circ L_y^x &= \bar{L}_a^b \circ \text{Exp}_y \circ \tau_y^x \left(\text{Exp}_x \right)^{-1} = \text{Exp}_{\bar{L}_b^a} \left(\bar{L}_b^a \right)_{*,y} \circ \tau_y^x \circ \left(\text{Exp}_x \right)^{-1} \end{aligned}$$

Итак, из приведенных соотношений видно, что равенства (1) и (2) выполняются.

Обратно, пусть левые сдвиги \bar{L}_b^a являются локальными изоморфизмами геоодулярного многообразия \mathcal{M} , а значит и локальными аффинными изоморфизмами связности ∇ . Тогда отображение $\left(\bar{L}_b^a \right)_{*,a}$ переводит тензоры $\left(\nabla^m T \right)_a$ и $\left(\nabla^m R \right)_a$ в тензоры $\left(\nabla^m T \right)_b$ и $\left(\nabla^m R \right)_b$ соответственно для $0 \leq m < \infty$. Поскольку $\left(\bar{L}_b^a \right)_{*,a} = \bar{\tau}_b^a$, то выполняется соотношение (1) и аффинная связность ∇ локально инвариантна относительно $\bar{\nabla}$.

Предложение 2: C^k - гладкое ($k \geq 0$) локальное геоодулярное многообразие $\mathcal{M} = \langle M, L, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$ локально инвариантно относительно некоторого C^k - гладкого локального геоодулярного многообразия, имеющего общие геодезические с \mathcal{M} с сохранением канонического параметра, тогда и только тогда, когда существует C^k - гладкое локальное отображение $\psi : M \times M \times M \rightarrow M$, $\psi(x, y, z) = \psi_y^x(z)$, такое, что для любого x из M $\psi_y^x : M \rightarrow M$ есть C^k - гладкий локальный диффеоморфизм, определенный на некоторой открытой окрестности U_x точки x при $y \in U_x$, и справедливы следующие соотношения:

$$\psi_y^x(y) = y, \quad (3)$$

$$\psi_y^x \circ t_x = t_x \circ \psi_y^x, \quad (4)$$

$$\psi_{t_x y} = L_y^x \circ \psi_{t_x y}^x \circ \left(\psi_y^x \right)^{-1} \circ \left(L_y^x \right)^{-1}, \quad (5)$$

$$L_z^y = L_y^x \circ \psi_y^x \circ L_{\left(\psi_y^x \right)^{-1} \left(L_y^x \right)^{-1} z}^x \circ \left(\psi_y^x \right)^{-1} \circ \left(L_y^x \right)^{-1}, \quad (6)$$

$$\bar{l}^x(y, z) \circ t_x = t_x \circ \bar{l}^x(y, z), \quad (7)$$

$$\bar{l}^x(y, z) \circ L_w^x = L_{\bar{l}^x(y, z)w}^x \circ \bar{l}^x(y, z), \quad (8)$$

где $\bar{l}^x(y, z) = \left(\psi_{L_y^x \psi_y^x z}^x \right)^{-1} \circ \left(L_{L_y^x \psi_y^x z}^x \right)^{-1} \circ L_y^x \circ \psi_y^x \circ L_z^x \circ \psi_z^x$, $x, y, z, w \in M$, $t \in R$

Доказательство: Пусть C^k - гладкое локальное геоодулярное многообразие $\mathcal{M} = \langle M, L, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$ локально инвариантно относительно C^k - гладкого локального геоодулярного многообразия $\bar{\mathcal{M}} = \langle M, \bar{L}, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$, причем M и $\bar{\mathcal{M}}$ имеют общие геодезические линии с сохранением канонического параметра. Определим $\psi_y^x = \left(L_y^x \right)^{-1} \circ \bar{L}_y^x$,

тогда $\psi_y^x(y) = (L_y^x)^{-1} \circ \bar{L}_y^x y = (L_y^x)^{-1} 2_x y = y$, и выполняется соотношение (3). Соотношения (4) и (5) следуют из тождеств геоодулярности в \mathcal{M} и $\bar{\mathcal{M}}$. Поскольку \mathcal{M} локально инвариантно относительно $\bar{\mathcal{M}}$, то, согласно соотношению (1), имеем: $L_z^y = \bar{L}_y^x \circ L_{(\bar{L}_y^x)^{-1} z}^x \circ (\bar{L}_y^x)^{-1}$, но $\bar{L}_y^x = L_y^x \circ \psi_y^x$ и, следовательно, выполняется соотношение (6). Легко видеть, что $\bar{l}^x(y, z) = (\bar{L}_{L_y^x z}^x)^{-1} \circ \bar{L}_y^x \circ \bar{L}_z^x$, и, т.к. левые сдвиги \bar{L}_y^x есть локальные изоморфизмы геоодулярного многообразия \mathcal{M} , то и $\bar{l}^x(y, z)$ есть также локальный изоморфизм \mathcal{M} , и справедливы соотношения (7) и (8).

Обратно, пусть для C^k - гладкого локального геоодулярного многообразия \mathcal{M} , существует C^k - гладкое локальное отображение $\psi : M \times M \times M \rightarrow M$, $\psi(x, y, z) = \psi_y^x(z)$, такое, что $\psi_y^x : M \rightarrow M$ есть C^k - гладкий локальный диффеоморфизм, определенный на некоторой открытой окрестности U_x точки x при $y \in U_x$, удовлетворяющий соотношениям (3) – (8). Определим $\bar{L}_y^x = L_y^x \circ \psi_y^x$, тогда из соотношений (3) – (5) следует, что $\bar{\mathcal{M}} = \langle M, \bar{L}, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$ есть C^k - гладкое локальное геоодулярное многообразие, имеющее общие геодезические линии с \mathcal{M} с сохранением канонического параметра. Тождества (1) и (2) легко выводятся из соотношений (6) – (8), поэтому \mathcal{M} локально инвариантно относительно $\bar{\mathcal{M}}$.

Предложение 3: C^k - гладкий ($k \geq 0$) локальный левый одуль $\mathcal{M}_e = \langle M, L^e, \{t_e\}_{t \in R}, e \rangle$ с нейтралом e может быть включен в качестве геодезического одуля в точке e в C^k - гладкое локальное геоодулярное многообразие \mathcal{M} , определенное на некоторой окрестности нейтрала e , локально инвариантно относительно C^k - гладкого локального редуктивного геоодулярного многообразия, имеющего общие геодезические с \mathcal{M} с сохранением канонического параметра тогда и только тогда, когда существует C^k - гладкое локальное отображение $\varphi : M \times M \rightarrow M$, $\varphi(x, y) = \varphi_x(y)$ такое, что для любого x $\varphi_x : M \rightarrow M$ есть C^k - гладкий локальный диффеоморфизм, определенный на некоторой открытой окрестности U_e нейтрала e при $x \in U_e$, и справедливы следующие соотношения:

$$\varphi_e(x) = x, \tag{9}$$

$$\varphi_x \circ t_e = t_e \circ \varphi_x, \tag{10}$$

$$\varphi_x(x) = x, \tag{11}$$

$$\varphi_{(t+u)_e x} = \varphi_{t_e x} \circ \varphi_{u_e x}, \tag{12}$$

$$L_{t_e x}^e \circ \varphi_x = L_x^e \circ \varphi_x \circ L_{(t-1)_e x}^e, \tag{13}$$

$$\bar{l}^e(x, y) \circ t_e = t_e \circ \bar{l}^e(x, y), \tag{14}$$

$$\bar{l}^e(x, y) \circ L_z^e = L_{\bar{l}^e(x, y)z}^e \circ \bar{l}^e(x, y), \tag{15}$$

$$\bar{l}^e(x, y) \circ \varphi_z = \varphi_{l^e(x, y)_z} \circ \bar{l}^e(x, y), \quad (16)$$

где $\bar{l}^e(x, y) = (\varphi_{L_x^e \varphi_x(y)})^{-1} \circ (L_{L_x^e \varphi_x(y)}^e)^{-1} \circ L_x^e \circ \varphi_x \circ L_y^e \circ \varphi_y$, где L_x^e - левые сдвиги лупы одуля \mathcal{M}_e , x и $t_e x$ - умножение на скаляры, x, y, z, w принадлежат некоторой открытой окрестности нейтрала e , $t, u \in R$.

Доказательство: Пусть C^k - гладкий локальный одуль \mathcal{M}_e включен в качестве геодезического одуля в точке e в C^k - гладкое локальное геоодулярное многообразие $\mathcal{M} = \langle V, L, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$, определенное на некоторой открытой окрестности V нейтрала e , причем \mathcal{M} локально инвариантно относительно C^k - гладкого локального редуktivного геоодулярного многообразия $\bar{\mathcal{M}} = \langle V, \bar{L}, (\bar{\omega}_t)_{t \in R} \rangle$, определим $\varphi_x = (L_x^e)^{-1} \circ \bar{L}_x^e$. Применяя предложение 2, убеждаемся в справедливости соотношений (9) – (11), (14), (15). Поскольку $\bar{\mathcal{M}}$ - локально редуktivно, то $\bar{l}^e_{(x, y)} \circ \bar{L}_z^e = \bar{L}^e_{l^e(x, y)_z} \circ \bar{l}^e(x, y)$, и, в силу соотношения (15), выполняется равенство (16). Подставляя в первое тождество геоодулярности в \mathcal{M} $L_{t_e}^x \circ L_x^e = L_{t_e x}^e$ выражение $L_{t_e x}^x = L_x^e \circ \varphi_x \circ L_{(\varphi_x)^{-1}(L_x^e)^{-1} t_e x}^e (\varphi_x)^{-1} (L_x^e)^{-1}$, имеющее место в силу (6), приходим к соотношению (13). Легко проверяется, что тождество левой моноальтернативности $\bar{L}_{u_e x}^e \circ \bar{L}_{t_e x}^e = \bar{L}_{(u+t)_e x}^e$ в силу соотношения (13) равносильно равенству (12).

Обратно, если для локального одуля \mathcal{M}_e определены C^k - гладкие локальные диффеоморфизмы $\varphi_x : M \rightarrow M$, удовлетворяющие соотношениям (39) – (16), то определим $\bar{L}_x^e = L_x^e \circ \varphi_x$, $\bar{L}_y^x = \bar{L}_x^e \circ \bar{L}_{(\bar{L}_x^e)^{-1} y}^e \bar{L}_x^e$, $t_x = \bar{L}_x^e \circ t_e \cdot \left(\bar{L}_x^e \right)^{-1}$, как показывает непосредственная проверка, $\bar{\mathcal{M}} = \langle V, \bar{L}, (\bar{\omega}_t)_{t \in R} \rangle$ есть C^k - гладкое локально редуktivное геоодулярное многообразие, определенное на некоторой открытой окрестности V нейтрала e . Далее определим $L_y^x = \bar{L}_x^e \circ L_{(\bar{L}_x^e)^{-1} y}^e \circ (\bar{L}_x^e)^{-1}$, тогда $\mathcal{M} = \langle V, L, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$ есть C^k - гладкое локальное геоодулярное многообразие локально инвариантное относительно $\bar{\mathcal{M}}$.

Определение 2: C^k - гладкое ($k \geq 0$) локальное геоодулярное многообразие $\mathcal{M} = \langle M, L, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$ называется почти симметрическим, если выполняются следующие два условия:

(а) для любых $a, b \in M$ композиция двух геодезических симметрий $(-1)_b \circ (-1)_a$ есть локальный изоморфизм \mathcal{M} ;

(б) справедливо тождество:

$$(-1)_a \circ (-1)_{t_a b} = (-1)_{t_b a} \circ (-1)_b. \quad (17)$$

Замечание: Используя результаты, изложенные в [16], можно показать, что при $k = \infty$ из условия (а) следует условие (б).

Предложение 4: C^k - гладкое ($k \geq 0$) локальное геоодулярное многообразие \mathcal{M} является почти симметрическим тогда и только тогда, когда \mathcal{M} локально инвариантно относительно локально симметрического геоодулярного многообразия $\overline{\mathcal{M}}$, имеющего общие геодезические с \mathcal{M} с сохранением канонического параметра.

Доказательство: Пусть $\mathcal{M} = \langle V, L, (\omega_t)_{t \in R} \rangle$ - C^k гладкое локальное почти симметрическое геоодулярное многообразие. Определим $\overline{L}_b^a = (-1) \left(\frac{1}{2} \right)_b \circ (-1)_a$. Тогда в силу определения 2 справедливые соотношения (1) и (2) и непосредственно проверяется, что $\overline{\mathcal{M}} = \langle \overline{V}, \overline{L}, (\overline{\omega}_t)_{t \in R} \rangle$ - C^k - гладкое локальное симметрическое геоодулярное многообразие. Обратно, если \mathcal{M} локально инвариантно относительно локально симметрического геоодулярного многообразия $\overline{\mathcal{M}}$, имеющего общие геодезические с \mathcal{M} с сохранением канонического параметра, то поскольку левый сдвиг в $\overline{\mathcal{M}}$ есть композиция двух геодезических симметрий, и в $\overline{\mathcal{M}}$ выполняется тождество (17) (как следствие первого тождества геоодулярности и локальной симметричности), то по определению 2. \mathcal{M} - почти симметрическое.

Предложение 5: C^k - гладкий ($k \geq 0$) локальный левый одуль $\mathcal{M}_e = \langle M, L^e, \{t_e\}_{t \in R} e \rangle$ с нейтралом e может быть включен в качестве геодезического одуля в точке e в C^k - гладкое локальное почти симметрическое геоодулярное многообразие тогда и только тогда, когда выполняется следующие тождества:

$$\varphi_{(t+u)_e x} = \varphi_{t_e x} \circ \varphi_{u_e x}, \quad (18)$$

$$L_{t_e x}^e \circ \varphi_x = L_x^e \circ \varphi_x \circ L_{(t-1)_e x}^e, \quad (19)$$

$$\overline{l}^e(x, y) \circ t_e = t_e \circ \overline{l}^e(x, y), \quad (20)$$

$$\overline{l}^e(x, y) \circ L_z^e = L_{l^e(x,y)z}^e \circ \overline{l}^e(x, y), \quad (21)$$

где

$$\varphi_x = (L_x^e)^{-1} S_x^e, \quad S_x^e = (-1) \left(\frac{1}{2} \right)_x \circ (-1)_e = L_{\left(\frac{1}{2} \right)_x}^e (-1)_e \left(L_{\left(\frac{1}{2} \right)_x}^e \right)^{-1} (-1)_e, \quad \overline{l}_{(x,y)}^e = (S_{S_x^e y}^e)^{-1} \circ S_x^e \circ S_y^e.$$

Доказательство: Предложение 5 непосредственно следует из предложений 4 и 3, поскольку в локально симметрическом геоодулярном многообразии левые сдвиги S_x^e геодезического одуля выражаются через геодезические симметрии: $S_x^e = (-1) \left(\frac{1}{2} \right)_x \circ (-1)_e$.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Akivis M.A., Goldberg V.V.* Local algebras of a differential quasigroup. //Bulletin of the American mathematical society. – V. 43, 2, 2006, p.p. 207-226.
2. *Ambrose W., Singer I.M.* On homogenous Riemannian manifolds. //Duke Math. J. – 1958. – V. 25. - p.p. 647-669.
3. *Figula Agota* Geodesic loops. //Journal of Lie theory. - V. 10. - 2000. – p.p.455-461.

4. *Hitotsuyanagi N.* Manifolds with a triple multiplication. //Math. Japonica. - №2. – 1997. - p.p. 345-353.
5. *Kostant B.* A characterization of invariant affine connections. //Nagoya Math. J. – 1960. – V. 16. - p.p.35-50.
6. *Matveyev O.A., Nesterenko E.L.* On the quasigroup properties of prosymmetric spaces with zero curvature. - Werbs & quasigroups. - Tver. - 2002. - pp. 78-84 /English/.
7. *Matveyev O.A., Nesterenko E.L.* The Real Prosymmetric Spaces. //Non-Associative Algebra and its applications. A Series of Lecture Notes in Pure and Applied Mathematics. - V. 246. - Chapter 19. - Champan &Hall/CRC 2006 USA.
8. *Molino P.* Champs d'elements sur un espace fibre principal differentiable. – Ann.Iust.Fourier (Grenoble). - 1964. - 14. - p.p.163-219.
9. *Nagy Peter T., Strambach K.* Loops in Group Theory and Lie Theory. -Walter de Gruyter. - Berlin-New York. - 2002. - 458 p.
10. *Nomizu K.* Invariant affine connections on homogeneous spaces //American J. Math. - 1964. - 76. - p.p.33-65.
11. *Sabinin L.V.* Non-Associative Algebra and its applications. //A Series of Lecture Notes in Pure and Applied Mathematics. - V. - chapter 19. - Champan &Hall /CRC . - 2006 . - USA/.
12. *Sabinin L.V., Matveev O.A.* Geodesic loops and some classes of affinely connected manifolds. (Survey on odular geometry). //Вестник РУДН. - 2(1). - 1995. - С. 135-243.
13. *Карпан Эли.* Геометрия групп Ли и симметрические пространства. //Сборник работ. – М.: ИЛ. - 1949. - 384 с.
14. *Карпан Эли.* Геометрия римановых пространств. – М.-Л. ОНТИ. - 1936. - 244 с.
15. *Кобаяси Ш., Номидзу К.* Основы дифференциальной геометрии. - т.1 - 2 – М.: Наука. - 1981.
16. *Лоос О.* Симметрические пространства. – М.: Наука. - 1985. - 208 с.
17. *Матвеев О.А.* О многообразиях с геодезическими. //Ткани и квазигруппы. – Калинин: КГУ. -1986. – С. 44-49.
18. *Матвеев О.А.* О пространствах аффинной связности, близких к симметричным. // Геометрия обобщенных пространств. Межвузовский сб-к. - Пенза. - 1992.
19. *Матвеев О.А, Нестеренко Е.Л.* О двусторонних пространствах аффинной связности. //Материалы международной научно-практической конференции «Л.Эйлер и Российское образование, наука и культура». - г. Тула. - 2-5 мая 2007г. - С. 207.
20. *Матвеев О.А, Нестеренко Е.Л.* Алгебраические и геометрические свойства просимметрических пространств. //XXXVI всероссийская научная конференция по проблемам математики, информатики, физики, химии и методики преподавания естественнонаучных дисциплин. - Тезисы докладов. - Математические секции. – М.: Изд-во РУДН. - 2000. - С.6.
21. *Матвеев О.А, Нестеренко Е.Л.* О теории редутивных проабелевых пространств. //Труды кафедры геометрии Московского Государственного областного университета №2. - Сборник научно-методических работ. – Москва: Издательство МГОУ. - 2005. - С.32-36.
22. *Матвеев О.А., Нестеренко Е.Л.* Просимметрические пространства. //Вестник РУДН. - серия математика. - 7(1). - 2000. - С. 114-126.
23. *Нестеренко Е.Л.* Алгебраические свойства аффинной связности на касательном расслоении. //Фундаментальные проблемы Физики и математики. – Москва. - 2004.

- Государственный Технологический Университет «СТАНКИН». - Институт математического моделирования РАН. - С. 31-45.
24. *Нестеренко Е.Л.* Редуктивные проабелевы пространства. //Актуальные проблемы математики и методики преподавания. - Пензенский университет. - 2001. - С. 76-78.
25. *Нестеренко Е.Л.* Свойства просимметрических пространств. //Тезисы научных докладов Международной научно-практической конференции «Народное образование в XXI веке», посвященной 70-летию МПУ. - М.: Изд-во МПУ «Народный учитель». - 2001. - С. 43.
26. *Сабинин Л.В.* Одули как новый подход к геометрии со связностью. - ДАН СССР. - 1977. - 233. - №5. - С.800-803.
27. *Сабинин Л.В.* Методы неассоциативной алгебры в дифференциальной геометрии. / Добавление к книге Кобаяси Ш., Номидзу К. Основы дифференциальной геометрии. - Т.1. – М.: Наука. - 1981. - С. 291-339.

ON LOCAL INVARIANT AFFINE CONNECTED SPACES

О. Matveyev, * Н. Nesterenko**

** Moscow State Regional University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

*** Peoples' Friendship University of Russia (PFUR)
6, Miklucho-Maklaya str., 117198, Moscow*

Abstract: In this paper the necessary and sufficient conditions for the wide class locally invariant affine connected manifolds are found. The cases of locally invariance of an affine connected space with respect to reductive and symmetric spaces are considered.

Key words: affine connection, locally invariance, reductive space, almost symmetric space, quasigroup.

УДК 512.57 + 510.67

ЭКВИВАЛЕНТНОСТЬ КАТЕГОРИЙ МОДЕЛЕЙ И УНИВЕРСАЛЬНЫХ АЛГЕБР, КАК ОСНОВА ПОСТРОЕНИЯ АЛГОРИТМОВ ОБРАБОТКИ РЕЛЯЦИОННЫХ БАЗ ЗНАНИЙ

А.Н. Мартынюк, О.А. Матвеев

*Московский государственный областной университет
105005, Москва, ул. Радио, 10а*

Аннотация. Доказывается эквивалентность категорий моделей и универсальных алгебр. Конструкция может быть использована для построения алгоритмов обработки реляционных баз знаний.

Ключевые слова: универсальная алгебра, модель, реляционные базы знаний.

Целью настоящей заметки является построение категории $U - ALGEBRAS$, эквивалентной категории моделей одной и той же сигнатуры с многозначными гомоморфизмами в качестве морфизмов. Объектами категории $U - ALGEBRAS$ служат однотипные универсальные алгебры, морфизмами – гомоморфизмы универсальных алгебр. Конструкция носит теоретико – множественный, алгебраический характер.

Представляет определенный интерес спецификация категории $U - ALGEBRAS$, используя аппарат топологии, нечетких множеств. Чтобы осуществлять направленный перебор вариантов в реляционных базах знаний, необходимо выбрать семантический базис первичных понятий. В этом может помочь выбор соответствующей топологии в основном носителе категории $U - ALGEBRAS$, то есть рассматривать не все возможные подмножества, а только замкнутые в выбранной топологии. Время поиска в той, или иной реляционной базе знаний существенно зависит от того, насколько сильна выбранная топология.

Взаимодействие и взаимосвязь системного подхода, теории множеств и теории категорий, бинарной логики и теории алгебраических систем, теории нечетких множеств, многозначной логики и топологии приводят к необходимости построения обобщенной трактовки типовой модели интеллектуальной базы знаний. Эта модель должна быть достаточно гибкой и универсальной для адекватного описания, а также детализации различных предметных областей.

Синтетический подход к моделированию, состоящий в применении различных мощных математических теорий, приводит и к формированию новых математических инструментов. Так, как нам представляется, успешно может быть использованы понятия топологической модели и топологической реляционной системы. Действительно, на языке топологии поддаются осмыслению и точному описанию семантические базисы (лингвистические тезаурусы), иерархический процесс представления базисных объектов наборами основных признаков с заданными внутренними ассоциативными связями. При таком подходе признаковое пространство наделяется топологической структурой и множеством четких и/или нечетких отношений различной местности. Граф состояний, получаемый при таком подходе, является достаточно точным аналогом моделируемой ситуации.

Создание алгоритмов для обработки реляционных баз знаний является актуальной проблемой [8-106].

Далее мы даем набросок построения совместной теории моделей и универсальных алгебр.

Определение 1. Моделью (реляционной системой) $M = \langle A, \Omega \rangle$ называется некоторое множество A с заданным на нем набором отношений различной арности (местности). Множество Ω называется сигнатурой. Арность отношения будем указывать верхним индексом в скобках: $R^{(n)} \in \Omega$.

Определение 2. Соответствие $\varphi \subset A \times B$ называется многозначным (двусторонним) гомоморфизмом из модели $M_1 = \langle A, \Omega \rangle$ в модель $M_2 = \langle B, \Omega \rangle$, если для любого n -арного отношения $R^{(n)}$ из сигнатуры Ω

$$((a_1, b_1) \in \varphi) \wedge \dots \wedge ((a_n, b_n) \in \varphi) \Rightarrow [R^{(n)}(a_1, \dots, a_n) \Leftrightarrow R^{(n)}(b_1, \dots, b_n)] \quad (1)$$

Модели одной и той же сигнатуры с многозначными гомоморфизмами в качестве морфизмов образуют категорию, которую мы будем обозначать *MODELS*.

Определение 3. Универсальной алгеброй $A = \langle A, \Phi \rangle$ называется множество A с заданным на нем набором Φ операций различной арности. Под n -арной ($n \geq 1$) операцией $\omega^{(n)} \in \Phi$ понимается отображение

$$\omega^{(n)}: \underbrace{A \times \dots \times A}_n \rightarrow A.$$

0-арная операция фиксирует в множестве A определенный элемент.

Из определений 1 и 3 следует, что универсальная алгебра является частным случаем модели. Действительно, для каждой n -арной операции $\omega^{(n)} \in \Phi$ универсальной алгебры $A = \langle A, \Phi \rangle$ можно определить $(n+1)$ -арное отношение $R^{(n+1)}$ на A следующей формулой

$$R^{(n+1)}(a_1, \dots, a_{n+1}) \Leftrightarrow a_{n+1} = \omega^{(n)}(a_1, \dots, a_n). \quad (2)$$

Определение 4. Отображение $f: A \rightarrow B$ называется гомоморфизмом универсальной алгебры A в универсальную алгебру B , если для любого $\omega^{(n)} \in \Phi$ и любых $a_1, \dots, a_n \in A$

$$f(\omega^{(n)}(a_1, \dots, a_n)) = \omega^{(n)}(f(a_1), \dots, f(a_n)). \quad (3)$$

Предложение 1. Пусть $M = \langle A, \Omega \rangle$ – модель. Для каждого отношения $R^{(n)}$ определим $(n-1)$ -арную операцию $\omega^{(n-1)}$ на множестве 2^A всех подмножеств из A следующим образом:

а) если $a_1, \dots, a_{n-1} \in A$, то определим:

$$\omega^{(n-1)}(a_1, \dots, a_{n-1}) = \{a \in A : R^{(n)}(a_1, \dots, a_{n-1}, a)\},$$

б) если $M_1, \dots, M_{n-1} \in 2^A$, $M_k \neq \emptyset$, $k = \overline{1, n-1}$, то

$$\omega^{(n-1)}(M_1, \dots, M_{n-1}) = \bigcup_{a_1 \in M_1} \dots \bigcup_{a_{n-1} \in M_{n-1}} \omega^{(n-1)}(a_1, \dots, a_{n-1})$$

в) если хотя бы одно из множеств $M_k \in 2^A$, $k = \overline{1, n-1}$ пусто, то

$$\omega^{(n-1)}(M_1, \dots, M_{n-1}) = \emptyset.$$

Пусть Φ – множество всех так определенных операций на множестве 2^A . Тогда $A = \langle 2^A, \cup, \emptyset, \Phi \rangle$ – универсальная алгебра, где \cup – бинарная операция объединения, \emptyset – нульарная операция взятия пустого множества и выполняются следующие тождества:

$$\begin{aligned} \omega^{(n)}(\emptyset, M_2, \dots, M_n) &= \emptyset, \\ \omega^{(n)}(M_1, \emptyset, \dots, M_n) &= \emptyset, \\ \omega^{(n)}(M_1, M_2, \dots, \emptyset) &= \emptyset, \end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned} \omega^{(n)}(M_1 \cup N_1, M_2, \dots, M_n) &= \\ &= \omega^{(n)}(M_1, M_2, \dots, M_n) \cup \omega^{(n)}(N_1, M_2, \dots, M_n), \\ \omega^{(n)}(M_1, M_2 \cup N_2, \dots, M_n) &= \\ &= \omega^{(n)}(M_1, M_2, \dots, M_n) \cup \omega^{(n)}(M_1, N_2, \dots, M_n), \end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned} \omega^{(n)}(M_1, M_2, \dots, M_n \cup N_n) &= \\ &= \omega^{(n)}(M_1, M_2, \dots, M_n) \cup \omega^{(n)}(M_1, M_2, \dots, N_n), \end{aligned}$$

Доказательство. Тождества (4) следуют из пункта в) определения операций $\omega^{(n)}$. Докажем, что выполняются тождества (5):

$$\begin{aligned} \omega^{(n)}(M_1 \cup N_1, M_2, \dots, M_n) &= \bigcup_{a_1 \in M_1 \cup N_1} \bigcup_{a_2 \in M_2} \dots \bigcup_{a_n \in M_n} \omega^{(n)}(a_1, a_2, \dots, a_n) = \\ &= \left[\bigcup_{a_1 \in M_1} \bigcup_{a_2 \in M_2} \dots \bigcup_{a_n \in M_n} \omega^{(n)}(a_1, a_2, \dots, a_n) \right] \cup \left[\bigcup_{a_1 \in N_1} \bigcup_{a_2 \in M_2} \dots \bigcup_{a_n \in M_n} \omega^{(n)}(a_1, a_2, \dots, a_n) \right] = \\ &= \omega^{(n)}(M_1, M_2, \dots, M_n) \cup \omega^{(n)}(N_1, M_2, \dots, M_n) \end{aligned}$$

Остальные тождества (5) доказываются аналогично.

Определение 5. Универсальную алгебру $A = \langle 2^A, \cup, \emptyset, \Phi \rangle$ будем называть надмодельной, если она может быть получена с помощью конструкции, изложенной в предложении 1, из некоторой модели $M = \langle A, \Phi \rangle$. В этом случае будем также говорить, что алгебра A построена над моделью M .

Предложение 2. Универсальная алгебра $A = \langle 2^A, U, \emptyset, \Phi \rangle$, в которой U – бинарная операция объединения, \emptyset – нульарная операция взятия пустого множества и для каждой операции $\omega^{(n)} \in \Phi$ выполняются тождества (4) и (5), является надмодельной.

Доказательство. На множестве 2^A определим для каждой n -арной операции $\omega^{(n)} \in \Phi$ $(n+1)$ -арное отношение $R^{(n+1)}$ на множестве 2^A следующим образом:

$$R^{(n+1)}(M_1, \dots, M_{n+1}) \Leftrightarrow M_{n+1} \subset \omega^{(n)}(M_1, \dots, M_n). \quad (6)$$

Рассмотрим ограничение отношения $R^{(n+1)}$ на множество A . Таким образом, получаем модель $M = \langle A, \Omega \rangle$, где сигнатура Ω состоит из всех так построенных операций $\omega^{(n)} \in \Phi$ отношений $R^{(n+1)}|_A$. Согласно предложению 1 построим надмодельную универсальную алгебру $\bar{A} = \langle 2^A, U, \emptyset, \bar{\Phi} \rangle$ и докажем, что $\bar{A} = A$. Для этого надо убедиться в том, что существует такая биекция $\phi: \Phi \rightarrow \bar{\Phi}$, что для любого $\omega^{(n)} \in \Phi$ выполняется равенство $\omega^{(n)} = \phi(\omega^{(n)})$. Биекция ϕ строится следующим образом: для любой операции $\omega^{(n)} \in \Phi$ по формуле (3) взаимно однозначно находится отношение $R^{(n+1)} \in \Omega$, по отношению $R^{(n+1)}$ взаимно однозначно находится операция $\bar{\omega}^{(n)} \in \bar{\Phi}$ по правилам а) – в) из предложения 1. Положим $\phi(\omega^{(n)}) = \bar{\omega}^{(n)}$. Если $a_1, \dots, a_n \in A$, то

$$a_{n+1} \in \omega^{(n)}(a_1, \dots, a_n) \Leftrightarrow R^{(n+1)}(a_1, \dots, a_{n+1}) \Leftrightarrow a_{n+1} \in \bar{\omega}^{(n)}(a_1, \dots, a_n).$$

Если $M_1, \dots, M_n \in 2^A$, $M_k \neq \emptyset$, $k = \overline{1, n}$, то по пункту б) из предложения 1

$$\bar{\omega}^{(n)}(M_1, \dots, M_n) = \bigcup_{a_1 \in M_1} \dots \bigcup_{a_n \in M_n} \bar{\omega}^{(n)}(a_1, \dots, a_n).$$

С другой стороны, применяя тождество (5), получаем

$$\omega^{(n)}(M_1, \dots, M_n) = \bigcup_{a_1 \in M_1} \dots \bigcup_{a_n \in M_n} \omega^{(n)}(a_1, \dots, a_n).$$

Следовательно, $\bar{\omega}^{(n)}(M_1, \dots, M_n) = \omega^{(n)}(M_1, \dots, M_n)$.

Если хотя бы одно из множеств $M_k \in 2^A$, $k = \overline{1, n}$ пусто, то по пункту в) предложения 1 $\bar{\omega}^{(n)}(M_1, \dots, M_n) = \emptyset$. С другой стороны, по тождествам (4) получаем $\omega^{(n)}(M_1, \dots, M_n) = \emptyset$. Итак, мы доказали, что $\phi(\omega^{(n)}) = \omega^{(n)}$.

Пример. Пусть $M = \langle A, \rho \rangle$ – модель с одним бинарным отношением ρ , которое является отношением квазипорядка, т.е. выполняются следующие условия:

$$a \rho a \text{ – рефлексивность,} \quad (7)$$

$$(a \rho b) \wedge (b \rho c) \Rightarrow a \rho c \text{ – транзитивность.} \quad (8)$$

В этом случае универсальная надмодельная алгебра имеет вид

$$A = \langle 2^A, U, \emptyset, \sigma \rangle,$$

где σ – унарная операция на 2^A , удовлетворяющая следующим тождествам:

$$\sigma(\emptyset) = \emptyset, \quad (9)$$

$$\sigma\left(\bigcup_{i \in I} M_i\right) = \bigcup_{i \in I} \sigma(M_i) \text{ – тождество линейности,} \quad (10)$$

(I – некоторое множество индексов),

$$M \subset \sigma(M), \quad (11)$$

$$\sigma(\sigma(M)) = \sigma(M) \text{ – тождество идемпотентности.} \quad (12)$$

Тождества (9) и (10) следуют соответственно из соотношений (4) и (5), тождества (11) и (12) непосредственно следуют из условий (7) и (8).

Заметим, что из тождеств (9) – (12) следует, что σ есть оператор замыкания Куратовского ([5], с. 18 – 19).

Нетрудно также проверить, что если в универсальной алгебре с унарной операцией выполняются тождества (9) – (12), то на A существует отношение квазипорядка ρ такое, что алгебра A построена над моделью $M = \langle A, \rho \rangle$.

Из предложений 1 и 2 следует

Предложение 3. Существует взаимно однозначное соответствие между моделями и универсальными алгебрами вида $A = \langle 2^A, U, \emptyset, \Phi \rangle$, где

U – бинарная операция объединения, \emptyset – нульарная операция взятия пустого множества и для любой операции выполняются тождества (4) и (5).

Предложение 4. Пусть $M_1 = \langle A, \Omega \rangle$ и $M_2 = \langle B, \Omega \rangle$ – модели, имеющие одну и ту же сигнатуру, $\varphi \subset A \times B$ – многозначный гомоморфизм из M_1 в M_2 . Пусть $A_1 = \langle 2^A, U, \emptyset, \Phi \rangle$ и $A_2 = \langle 2^B, U, \emptyset, \Phi \rangle$ – универсальные алгебры, построенные соответственно над моделями M_1 и M_2 . Определим отображение $f_\varphi : 2^A \rightarrow 2^B$ следующим образом:

$$а) f_\varphi(\emptyset) = \emptyset,$$

$$б) \forall a \in A \quad f_\varphi(a) = \{b \in B : (a, b) \in \varphi\},$$

$$в) \forall M \in 2^A \quad f_\varphi(M) = \bigcup_{a \in M} f_\varphi(a).$$

Тогда отображение f_φ есть гомоморфизм из универсальной алгебры A_1 в универсальную алгебру A_2 .

Доказательство. Требуется доказать, что отображение обладает следующими свойствами:

$$f_\varphi(\emptyset) = \emptyset, \quad (13)$$

$$f_\varphi(N \cup M) = f_\varphi(N) \cup f_\varphi(M), \quad (14)$$

$$f_\varphi(\omega^{(n)}(M_1, \dots, M_n)) = \omega^{(n)}(f_\varphi(M_1), \dots, f_\varphi(M_n)) \quad (15)$$

$$\forall \omega^{(n)} \in \Phi, \quad M_1, \dots, M_n \in 2^A.$$

Свойство (13) следует из пункта а) предложения 4. Докажем свойство (14):

$$f_\varphi(N \cup M) = \bigcup_{a \in N \cup M} f_\varphi(a) = \left(\bigcup_{a \in N} f_\varphi(a) \right) \cup \left(\bigcup_{a \in M} f_\varphi(a) \right) = f_\varphi(N) \cup f_\varphi(M).$$

Докажем свойство (15):

$$\begin{aligned} b \in f_\varphi(\omega^{(n)}(M_1, \dots, M_n)) &\Leftrightarrow (\exists a \in \omega^{(n)}(M_1, \dots, M_n) : b \in f_\varphi(a)) \Rightarrow \\ &\Rightarrow (\exists a \in \omega^{(n)}(M_1, \dots, M_n) : (a, b) \in \varphi) \Rightarrow \\ &\Rightarrow (\exists a : R^{(n+1)}(M_1, \dots, M_n, a) \wedge ((a, b) \in \varphi)) \Rightarrow \\ &\Rightarrow (\exists a \in A : \forall a_1 \in M_1, \dots, \forall a_n \in M_n \quad R^{(n+1)}(a_1, \dots, a_n, a) \wedge ((a, b) \in \varphi)) \Rightarrow \\ &\Rightarrow (\forall a_1 \in M_1, \dots, \forall a_n \in M_n : ((a_1, b_1) \in \varphi) \wedge \dots \wedge ((a_n, b_n) \in \varphi) \wedge ((a, b) \in \varphi)) \Rightarrow \\ &\Rightarrow R^{(n+1)}(b_1, \dots, b_n, b) \Leftrightarrow R^{(n+1)}(f_\varphi(M_1), \dots, f_\varphi(M_n), b) \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow b \in \omega^{(n)}(f_\varphi(M_1), \dots, f_\varphi(M_n)). \end{aligned}$$

Обращая рассуждения предложения 4, приходим к следующему результату:

Предложение 5. Пусть $A_1 = \langle 2^A, \cup, \emptyset, \Phi \rangle$ и $A_2 = \langle 2^B, \cup, \emptyset, \Phi \rangle$ – универсальные алгебры, построенные над моделями $M_1 = \langle A, \Omega \rangle$ и $M_2 = \langle B, \Omega \rangle$. Пусть $f : A_1 \rightarrow A_2$ – гомоморфизм. Тогда существует единственный многозначный гомоморфизм φ из модели M_1 в модель M_2 такой, что

$$а) \quad \forall a \in A \quad f(a) = \{b \in B : (a, b) \in \varphi\},$$

$$б) \quad \forall M \in 2^A \quad f(M) = \bigcup_{a \in M} f(a).$$

Определение 6. Категорию, объектами которой являются универсальные алгебры вида $A = \langle 2^A, \cup, \emptyset, \Phi \rangle$, с тождествами (4) и (5), а морфизмами – гомоморфизмы, будем называть категорией $U - ALGEBRAS$.

Предложения 1 – 5 приводят к следующему результату.

Теорема. Категории $MODELS$ и $U - ALGEBRAS$ – эквивалентны.

Сформулируем основные выводы из построенной конструкции.

- 1) Сведение моделей к некоторому примитивному классу универсальных алгебр влечет за собой обогащение теории моделей; в частности, возможно перенесение на модели понятий конгруэнции, фактор–алгебры и так далее. Так, например, понятие конгруэнции приводит к иерархии представлений реляционной системы.
- 2) Эквивалентность категории моделей некоторой категории универсальных алгебр может служить основой построения алгоритмов обработки реляционных баз знаний.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Курош А.Г.* Общая алгебра. М.: Наука, 1974. – 160с.
2. *Биркгоф Г., Барти Т.* Современная прикладная алгебра. М.: Мир, 1976. – 400с.
3. *Мальцев А.И.* Алгебраические системы. М.: Наука, 1970. – 392с.
4. *Шнейдер Ю.А., Шаров А.А.* Системы и модели. М.: Радио и связь, 1982. – 152с.
5. *Александрян Р.А., Мирзаханян Э.А.* Общая топология. М.: Высшая школа, 1979. – 336с.

6. *Матвеев О.А., Панишина А.В.* К эквивалентности категорий моделей и универсальных алгебр // Материалы X конф. молодых ученых, М.: УДН, 1987 – Деп. в ВИНТИ, № 9153–В 87, с. 144–150.
7. *Бочаров В.Е., Матвеев О.А., Панишина А.В.* О топологических реляционных системах // Материалы 11 конф. молодых ученых, М.: УДН, 1988 – Деп. в ВИНТИ, № 5305–В 88, с. 110–121.
8. *Tin C. Truong, Anh N. Tran.* Structure of Set of Association Rules Based on Concept Lattice In: N. T. Nguyen, R. Katarzyniak, S.-M. Chen (Eds.) Studies in Computational Intelligence, Vol. 283, pp. 217–228. Springer–Verlag, Heidelberg, 2010.
9. *Taouil P. N., Bastide R., Stumme Y., Lakhal G.* Generating a condensed representation for association rules. J. of Intelligent Information Systems 24(1), pp. 29–60, Springer US, 2005.
10. *Viswanath N., Sunderraman R.* A Paraconsistent Relational Data Model In: V. E. Ferragane, J. H. Doorn, L. C. Rivero (Eds.) Handbook of Research on Innovations in Database Technologies and Applications: Current and Future Trends, Vol. I, pp. 18–27, Information Science Reference, N.Y., 2009.

**THE CATEGORY EQUIVALENCE OF MODELS AND UNIVERSAL
ALGEBRAS AS THE BASIS OF THE CONSTRUCTION
OF THE ALGORITHMS OF PROCESSING
OF INTELLIGENT RELATIONAL DATABASES**

A. Martynyuk, O. Matveyev

*Moscow State Regional University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. The category equivalence of models and universal algebras is proved. The construction may be used of the construction of the algorithms of processing of intelligent relation data bases.

Key words: universal algebra, model, intelligent relational databases.

УДК 517.947

**ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПЛОСКИХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ
С НЕЛИНЕЙНЫМ УРАВНЕНИЕМ ДИФФУЗИИ В ИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ**

М.Ю. Захаров,^{*} Е.А. Семенчин^{}**

^{*} *ОАО «Научно-производственное объединение «Промавтоматика» (г. Краснодар)*

^{**} *Кубанский государственный университет (г. Краснодар)*

Аннотация. В статье рассматриваются первая и вторая двумерные краевые задачи для уравнения диффузии в изотропной среде с зависящим от концентрации коэффициентом (диффузии). Численное решение таких задач сопряжено с большими трудностями. Используется методика, основанная на дискретизации исходных задач по времени и итерационном процессе построения для каждого рассматриваемо-

го момента времени приближенных решений вспомогательных линейных задач. Приближенные решения вспомогательных задач строятся методом базисных потенциалов. С помощью данной методики построены приближенные решения рассматриваемых нелинейных задач. Приведен общий вид этих приближенных решений. На конкретных примерах показана сходимость приближенных решений задач к точным.

Ключевые слова: метод базисных потенциалов, краевые задачи с нелинейными уравнениями, диффузия в изотропной среде.

Введение

Известно, что коэффициенты диффузии в жидкостях могут существенным образом зависеть от концентрации диффундирующего вещества [1, 511]. Часто коэффициент диффузии линейно зависит от концентрации, но в некоторых случаях (например, в водных растворах метанола, этанола и ацетона) с увеличением концентрации он вначале уменьшается, а затем – возрастает [1, 498; 2].

Для описания процесса диффузии в вышеуказанных растворах используются краевые задачи для квазилинейных уравнений с дивергентной главной частью [3, 110; 4, 55; 5, 431; 6, 509, 541]. Условия существования и единственности классических решений первой и второй краевых задач для таких уравнений приведены в [6, 513, 560]. Однако их численное решение наталкивается на значительные трудности [7, 271]. В данной работе методом, описанным в [8], будут построены в явном аналитическом виде приближенные решения подобных задач.

1. Постановки задач

Задача 1. Плоская первая краевая задача, описывающая диффузию в изотропной среде в случае, когда коэффициент диффузии зависит от концентрации диффундирующего вещества, имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial \omega}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left[f(\omega) \frac{\partial \omega}{\partial x_1} \right] + \frac{\partial}{\partial x_2} \left[f(\omega) \frac{\partial \omega}{\partial x_2} \right] = \\ = f(\omega) \Delta \omega + f_{\omega}'(\omega) \left[\left(\frac{\partial \omega}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \omega}{\partial x_2} \right)^2 \right], \mathbf{x} \in G \subset R^2, \\ \omega = \omega_0(\mathbf{x}) \text{ при } t = 0, \\ \omega = \omega_S(t, \mathbf{x}) \text{ на } \Sigma, \end{cases} \quad (1.1)$$

где: $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$;

$\omega = \omega(t, x_1, x_2)$ - концентрация диффундирующего вещества, $\omega \geq a > 0$; $a = \text{const}$.

$f(\omega)$ - коэффициент диффузии, $f(\omega) \geq b > 0$, $b = \text{const}$;

G - ограниченная односвязная область с достаточно гладкой границей Σ .

Будем предполагать, что

$$\Sigma \in C^3, \omega_0 \in C^3(\bar{G}), \omega_S \in C_{t,x}^{2,3}((0, +\infty) \times \Sigma), f(\omega) \in C^2(a, +\infty). \quad (1.2)$$

В этом случае классическое решение (1.1) существует и единственно [6, 513].

Задача 2. Плоская вторая краевая задача, описывающая диффузию в изотропной среде в случае, когда коэффициент диффузии зависит от концентрации диффундирующего вещества, имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial \omega}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left[f(\omega) \frac{\partial \omega}{\partial x_1} \right] + \frac{\partial}{\partial x_2} \left[f(\omega) \frac{\partial \omega}{\partial x_2} \right] = \\ = f(\omega) \Delta \omega + f'_{\omega}(\omega) \left[\left(\frac{\partial \omega}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \omega}{\partial x_2} \right)^2 \right], \mathbf{x} \in G \subset R^2, \\ \omega = \omega_0(\mathbf{x}) \text{ при } t = 0, \\ f(\omega) \frac{\partial \omega}{\partial n} = \omega_s(t, \mathbf{x}) \text{ на } \Sigma. \end{cases} \quad (1.3)$$

где: $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$;

$\omega = \omega(t, x_1, x_2)$ - концентрация диффундирующего вещества, $\omega \geq a > 0, a = const$;

$f(\omega)$ - коэффициент диффузии, $f(\omega) \geq b > 0, b = const$;

G - ограниченная односвязная область с достаточно гладкой границей Σ ;

$\frac{\partial}{\partial n}$ - дифференцирование по направлению внешней к G нормали.

Будем предполагать, что

$$\Sigma \in C^3, \omega_0 \in C^1(\overline{G}), \omega_s \in C_{t,x}^{1,2}((0, +\infty) \times \Sigma), f(\omega) \in C^2(a, +\infty). \quad (1.4)$$

В этом случае классическое решение (1.3) существует и единственно [6, 560].

Замечание. При $f(\omega) = \omega$ уравнение в (1.1), (1.3) называется уравнением Буссинеска [3, 102].

Цель данной работы – с помощью методики, предложенной в [8], построить приближенные решения задач (1.1), (1.3) при $f(\omega) = \omega$, провести численный анализ этих решений.

2. Методика построения приближенного решения задачи 1

Процесс построения приближенного решения задачи (1.1) разобьем на два этапа [8].

2.1. Проведем дискретизацию задачи (1.1) по времени.

Пусть $\Psi_k(\mathbf{x})$ - приближение решения задачи (1.1) в момент времени $t_k, k = 0, 1, \dots, t_0 = 0, \Psi_0(\mathbf{x}) = \omega_0(\mathbf{x}), t_{k+1} - t_k = \tau$. Используя неявную аппроксимационную схему, запишем для определения $\Psi_{k+1}(\mathbf{x}), k = 0, 1, \dots$, следующие задачи:

$$\begin{cases} \frac{\Psi_{k+1}(\mathbf{x}) - \Psi_k(\mathbf{x})}{\tau} = f(\Psi_{k+1}) \Delta \Psi_{k+1}(\mathbf{x}) + \\ f'_{\Psi_{k+1}}(\Psi_{k+1}) \left[\left(\frac{\partial \Psi_{k+1}(\mathbf{x})}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Psi_{k+1}(\mathbf{x})}{\partial x_2} \right)^2 \right], \mathbf{x} \in G, \\ \Psi_{k+1}(\mathbf{x})|_{\Sigma} = \omega_s(t_{k+1}, \mathbf{x}). \end{cases} \quad (2.1)$$

2.2. Построим при-

ближенное решение задачи (2.1).

Рассмотрим вспомогательную задачу:

$$\begin{cases} \Delta \Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}) = \Phi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in G, \\ \Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x})|_{\Sigma} = \omega_s(t_{k+1}, \mathbf{x}), \end{cases} \quad (2.2)$$

где $k = 0, 1, \dots$

Приближенное решение (2.2) $(\Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}))_N$ будем искать методом точечных потенциалов [9].

Начальное приближение $\Phi_{k+1}^{(1)}(\mathbf{x})$ правой части уравнения в (2.2) выбираем из $C^\alpha(\bar{G})$ ($0 < \alpha < 1$). Тогда при заданной функции $\omega_s(t_{k+1}, \mathbf{x})$ из (2.2) в силу (1.2) решение (2.2) при $i = 1$ существует, единственно и принадлежит $C^2(\bar{G})$ ([10, 145]). Последующие приближения $\Phi_{k+1}^{(i+1)}(\mathbf{x})$, $i = 1, 2, \dots$, в правой части уравнения из (2.2) определяются соотношением:

$$\Phi_{k+1}^{(i+1)}(\mathbf{x}) = \left[\frac{(\Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}))_N - \Psi_k(\mathbf{x})}{\tau} - f_{(\Psi_{k+1}^{(i)})_N} \left((\Psi_{k+1}^{(i)})_N \right) \left[\left(\frac{\partial (\Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}))_N}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial (\Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}))_N}{\partial x_2} \right)^2 \right] \right] / f((\Psi_{k+1}^{(i)})_N), \mathbf{x} \in G \quad (2.3)$$

На основании (1.2) для $\Phi_{k+1}^{(i+1)}(\mathbf{x})$ из (2.3), при заданной $\omega_s(t_{k+1}, \mathbf{x})$ из (2.2), решение (2.2) также существует и принадлежит $C^2(\bar{G})$ ([10, 145]).

Процесс построения приближенных решений $(\Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}))_N$ задачи (2.2) для приближений правой части уравнения (2.2), определяемых (2.3), завершаем для заданного $\varepsilon > 0$ на l_{k+1} -й итерации, если выполнится неравенство

$$\left\| \Phi_{k+1}^{(l_{k+1})}(\mathbf{x}) - \Phi_{k+1}^{(l_{k+1}+1)}(\mathbf{x}) \right\|_{C(\bar{G})} < \varepsilon.$$

В этом случае полагаем:

$$\Psi_{k+1}(\mathbf{x}) \approx (\Psi_{k+1}^{(l_{k+1})}(\mathbf{x}))_N.$$

После определения $\Psi_{k+1}(\mathbf{x})$, найдем аналитический вид приближенного решения задачи (2.1), воспользовавшись результатами работы [9]:

$$\Psi_{k+1}(\mathbf{x}) \approx \frac{1}{A} \left(- \int_G \Phi_{k+1}^{(l_{k+1})}(\mathbf{y}) \ln \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} d\mathbf{y} - \int_{\Sigma} \omega_s(t_{k+1}, \mathbf{y}) \frac{\partial}{\partial n_y} \ln \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} - \left(\sum_{j=1}^N c_j^{(k+1)} \alpha_j(\mathbf{y}) + C \right) \ln \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} d\mathbf{y} \right), \quad (2.4)$$

где $A = 2\pi$, $\mathbf{x} \in G$; π , $\mathbf{x} \in \Sigma$; $c_j^{(k+1)}$ - коэффициенты, определяющие приближение неизвестной плотности логарифмического потенциала простого слоя $\frac{\partial \Psi_{k+1}(\mathbf{y})}{\partial n}$:

$$\frac{\partial \Psi_{k+1}(\mathbf{y})}{\partial n} \approx \left(\sum_{j=1}^N c_j^{(k+1)} \alpha_j(\mathbf{y}) + C \right); \quad k = 0, 1, \dots; \quad \alpha_j(\mathbf{y}) = \ln |\mathbf{x}^j - \mathbf{y}|^{-1} - J_j, \quad \mathbf{y} \in \Sigma,$$

$$J_j = \int_{\Sigma} \ln |\mathbf{x}^j - \mathbf{y}|^{-1} ds_y / |\Sigma|, \quad \mathbf{x}^j \notin \bar{G}, \quad j = 1, 2, \dots, N; \quad C = \int_G \Phi_{k+1}^{(k+1)}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} / |\Sigma|, \quad |\Sigma| - \text{мера } \Sigma.$$

Замечание. В силу равномерной сходимости приближенного решения первой краевой задачи для уравнения Пуассона к точному и устойчивости приближенного решения к возмущениям правой части уравнения [9] из сходимости в $L_2(G)$ последовательности $\Phi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x})$ при $i \rightarrow \infty$ следует сходимость в $C(\bar{G})$ $(\Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}))_N \rightarrow \Psi_{k+1}(\mathbf{x})$ при $N \rightarrow \infty, i \rightarrow \infty$. Сходимость последовательности $\Phi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x})$ при $i \rightarrow \infty$ можно обеспечить путем выбора подходящей величины шага дискретизации τ .

3. Методика построения приближенного решения задачи 2

Будем дополнительно требовать выполнения условия непроницаемости границы для диффузии:

$$f(\omega) \frac{\partial \omega}{\partial n} = 0 \text{ на } \Sigma,$$

оно позволяет использовать для приближенного решения нижеуказанной вспомогательной задачи (см. (3.2)) метод точечных потенциалов.

По аналогии с п. 2 рассмотрим два этапа построения приближенного решения.

3.1. Проведем дискретизацию задачи (1.3) по времени.

Пусть $\Psi_k(\mathbf{x})$ - приближение решения задачи (1.3) в момент времени t_k , $k = 0, 1, \dots$, $t_0 = 0$, $\Psi_0(\mathbf{x}) = \omega_0(\mathbf{x})$, $t_{k+1} - t_k = \tau$. Используя неявную аппроксимационную схему, запишем для определения $\Psi_{k+1}(\mathbf{x})$, $k = 0, 1, \dots$, следующие задачи:

$$\begin{cases} \frac{\Psi_{k+1}(\mathbf{x}) - \Psi_k(\mathbf{x})}{\tau} = f(\Psi_{k+1}) \Delta \Psi_{k+1}(\mathbf{x}) + f'_{\Psi_{k+1}}(\Psi_{k+1}) \left[\left(\frac{\partial \Psi_{k+1}(\mathbf{x})}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Psi_{k+1}(\mathbf{x})}{\partial x_2} \right)^2 \right], \quad \mathbf{x} \in G, \\ f(\Psi_{k+1}(\mathbf{x})) \frac{\partial \Psi_{k+1}(\mathbf{x})}{\partial n} \Big|_{\Sigma} = 0. \end{cases} \quad (3.1)$$

3.2. Построим приближенное решение задачи (3.1).

Рассмотрим вспомогательную задачу:

$$\begin{cases} \Delta \Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}) = \Phi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in G, \\ \frac{\partial \Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x})}{\partial n} \Big|_{\Sigma} = 0, \end{cases} \quad (3.2)$$

где $k = 0, 1, \dots$.

Приближенное решение (3.2) $(\Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}))_N$ будем искать методом точечных потенциалов [11]. Известно, что решение задачи (3.2) определено с точностью до постоянного слагаемого. Это слагаемое определим, исходя из условия сохранения массы примеси:

$$\int_G \left((\Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}))_N - \omega_0(\mathbf{x}) \right) d\mathbf{x} = 0, \quad (3.3)$$

которое вытекает из соотношения:

$$f(\omega) \frac{\partial \omega}{\partial n} = 0 \text{ на } \Sigma.$$

В дальнейшем будем считать, что в приближенном решении (3.2) постоянное слагаемое скорректировано и $(\Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}))_N$ удовлетворяет условию (3.3).

Начальное приближение $\Phi_{k+1}^{(1)}(\mathbf{x})$ правой части уравнения в (3.2) выбираем из $C^\alpha(\bar{G})$ ($0 < \alpha < 1$). Тогда при заданном граничном условии решение (3.2) при $i = 1$ существует и принадлежит $C^2(\bar{G})$ ([10, 179]). Последующие приближения $\Phi_{k+1}^{(i+1)}(\mathbf{x})$, $i = 1, 2, \dots$, в правой части уравнения из (3.2) определяются соотношением:

$$\Phi_{k+1}^{(i+1)}(\mathbf{x}) = \left\{ \frac{(\Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}))_N - \Psi_k(\mathbf{x})}{\tau} - f_{(\Psi_{k+1}^{(i)})_N} \left((\Psi_{k+1}^{(i)})_N \right) \left[\left(\frac{\partial (\Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}))_N}{\partial \alpha_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial (\Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}))_N}{\partial \alpha_2} \right)^2 \right] \right\} / f \left((\Psi_{k+1}^{(i)})_N \right), \mathbf{x} \in G \quad (3.4)$$

На основании (1.4) для $\Phi_{k+1}^{(i+1)}(\mathbf{x})$ из (3.4), при заданном граничном условии, решение (3.2) также существует и принадлежит $C^2(\bar{G})$ ([10, 179]).

Согласно формуле Грина и (3.2) для $\Phi_{k+1}^{(i+1)}(\mathbf{x})$ из (3.4) должно выполняться соотношение:

$$\int_G \Phi_{k+1}^{(i+1)}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0. \quad (3.5)$$

При необходимости корректируем $\Phi_{k+1}^{(i+1)}(\mathbf{x})$ с помощью аддитивной постоянной так, чтобы выполнялось условие (3.5).

Процесс построения приближенных решений $(\Psi_{k+1}^{(i)}(\mathbf{x}))_N$ задачи (3.2) для приближений правой части уравнения (3.2), определяемых (3.4), завершаем для заданного $\varepsilon > 0$ на l_{k+1} -й итерации, если выполнится неравенство

$$\left\| \Phi_{k+1}^{(l_{k+1})}(\mathbf{x}) - \Phi_{k+1}^{(l_{k+1}+1)}(\mathbf{x}) \right\|_{C(\bar{G})} < \varepsilon.$$

В этом случае полагаем:

$$\Psi_{k+1}(\mathbf{x}) \approx (\Psi_{k+1}^{(l_{k+1})}(\mathbf{x}))_N.$$

Используя результаты [11], приведем аналитический вид приближенного решения задачи (3.1):

$$\Psi_{k+1}(\mathbf{x}) \approx \frac{1}{A} \left[- \int_G \Phi_{k+1}^{(k+1)}(\mathbf{y}) \ln \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} d\mathbf{y} - \int_{\Sigma} \left(\sum_{j=1}^N c_j^{(k+1)} \beta_j(\mathbf{y}) \right) \frac{\partial}{\partial n_y} \ln \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} d\mathbf{s}_y \right], \quad (3.6)$$

где $A = 2\pi$, $\mathbf{x} \in G$; π , $\mathbf{x} \in \Sigma$; $c_j^{(k+1)}$ - коэффициенты, определяющие приближение неизвестной плотности логарифмического потенциала двойного слоя $\Psi_{k+1}(\mathbf{y})$:

$$\Psi_{k+1}(\mathbf{y}) \approx \left(\sum_{j=1}^N c_j^{(k+1)} \beta_j(\mathbf{y}) \right); \quad k = 0, 1, \dots; \quad \beta_j(\mathbf{y}) = \frac{\partial}{\partial n_y} \ln \frac{1}{|\mathbf{x}^j - \mathbf{y}|} = \frac{(\mathbf{x}^j - \mathbf{y}, \mathbf{n}_y)}{|\mathbf{x}^j - \mathbf{y}|^2}, \quad \mathbf{y} \in \Sigma,$$

$\mathbf{x}^j \notin \bar{G}$, $j = 1, 2, \dots, N$.

4. Пример 1

Построим вышеописанным методом (с использованием среды Borland Delphi 7 и вычислительных библиотек компилятора Compaq Fortran) приближенное решение задачи (1.1) при $f(\omega) = \omega$.

Пусть область G представляет собой круг единичного радиуса с центром в начале координат: $G = \{(x_1, x_2) : x_1^2 + x_2^2 < 1\}$. Зададим в G функцию [3, 103]:

$$\omega(t, x_1, x_2) = -\frac{x_2^2}{6(t+1)} + x_1(t+1)^{-1/3} + 1,5(t+1)^{1/3}, \quad (4.1)$$

которая является точным решением задачи (1.1) при $f(\omega) = \omega$. Тогда

$$\begin{aligned} \omega(0, x_1, x_2) &= \omega_0(x_1, x_2) = -\frac{x_2^2}{6} + x_1 + 1,5, \\ \omega(t, x_1, x_2)|_{\Sigma} &= \omega_s(t, x_1, x_2) = \omega_s^0(t, r, \varphi)|_{r=1, \varphi \in [0, 2\pi]} = -\frac{\sin^2 \varphi}{6(t+1)} + \cos \varphi (t+1)^{-1/3} + 1,5(t+1)^{1/3}. \end{aligned}$$

Пусть $t \in [0, 1]$, шаг дискретизации по времени $\tau = 0,1$, $\|\omega(t_{k+1}, \mathbf{x}) - \Psi_{k+1}(\mathbf{x})\|_{C(\bar{G})} < \varepsilon$, $k = 0, 1, \dots, 9$, $\varepsilon = 10^{-2}$.

Значения $\Phi_{k+1}^{(i+1)}(\mathbf{x})$ были найдены с помощью (2.3) (во всех узлах интегрирования по G). В качестве первого приближения правой части уравнения в (2.2) для каждого временного слоя был выбран лапласиан решения, полученного на предыдущем временном слое:

$$\Delta \Psi_{k+1}^{(1)}(\mathbf{x}) = \Delta \Psi_k(\mathbf{x}), \quad k = 0, 1, \dots, 9,$$

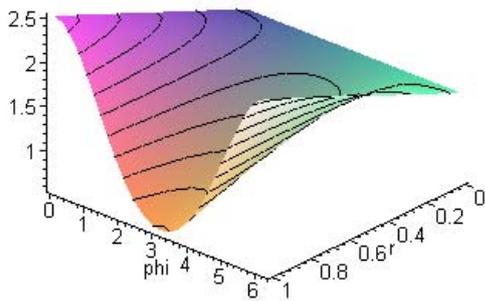
где $\Delta \Psi_k(\mathbf{x}) = \Delta(\Psi_k^{(i_k)}(\mathbf{x}))_N = \Phi_k^{(i_k)}(\mathbf{x})$, $\|\omega(t_k, \mathbf{x}) - (\Psi_k^{(i_k)}(\mathbf{x}))_N\|_{C(\bar{G})} < \varepsilon$, $k = 1, \dots, 9$.

Приближенное решение (2.1) (см. (2.4)) в данном случае имеет вид:

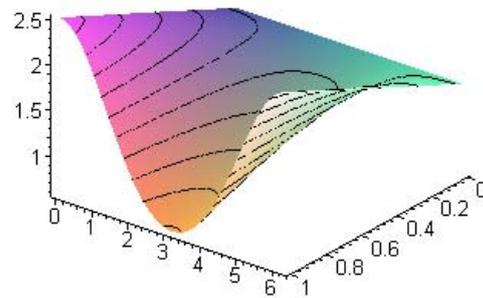
$$\Psi_{k+1}(\mathbf{x}) \approx \frac{1}{A} \left(- \int_G \Phi_{k+1}^{(i_{k+1})}(\mathbf{y}) \ln \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} d\mathbf{y} - \int_{\Sigma} \left[\omega(t_{k+1}, \mathbf{y}) \frac{\partial}{\partial n_y} \ln \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} - \left(\sum_{j=1}^{40} c_j^{(k+1)} \alpha_j(\mathbf{y}) + C \right) \ln \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \right] d\mathbf{s}_y \right), \quad (4.2)$$

где $k = 0, 1, \dots, 9$, $|\mathbf{x}^j| = 1, 2, j = 1, 2, \dots, 40$.

Сравнивая значения построенного приближенного (4.2) и точного (4.1) решений задачи (1.1) для различных моментов времени, убедимся, что они отличаются незначительно: абсолютная погрешность имеет порядок 10^{-3} (см. рисунки 1-3).

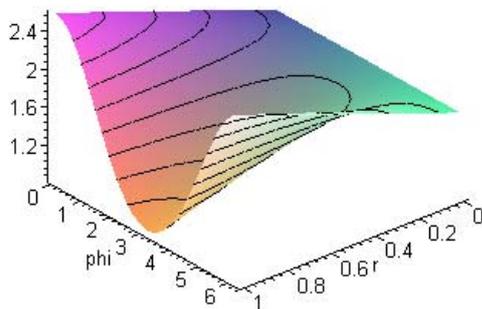


Точное решение

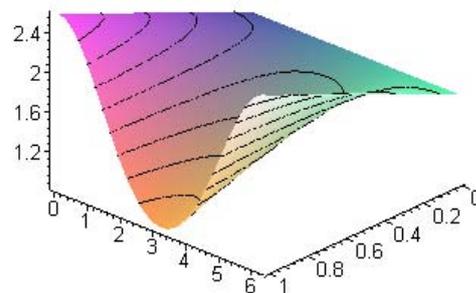


Приближенное решение

Рис. 1. Точное и приближенное решение задачи 1 для $t=0,1$
(Количество итераций: 1; норма в $C(\bar{G})$ разности решений: 0,008)

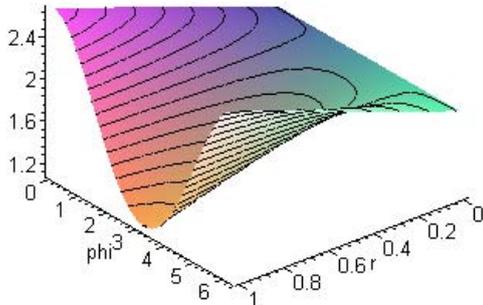


Точное решение

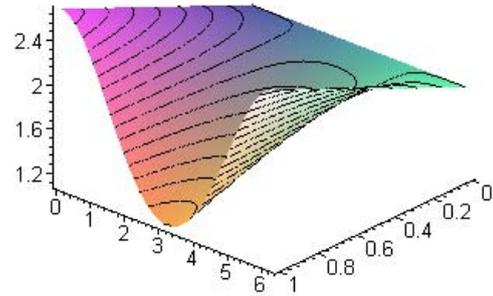


Приближенное решение

Рис. 2. Точное и приближенное решение задачи 1 для $t=0,5$
(Количество итераций: 1, норма в $C(\bar{G})$ разности решений: 0,009)



Точное решение



Приближенное решение

Рис. 3. Точное и приближенное решение задачи 1 для $t=1,0$
(Количество итераций: 1, норма в $C(\bar{G})$ разности решений: 0,009)

5. Пример 2

Построим вышеописанным методом (с использованием среды Borland Delphi 7 и вычислительных библиотек компилятора Compaq Fortran) приближенное решение задачи (1.3) при $f(\omega) = \omega$.

Пусть область G представляет собой круг единичного радиуса с центром в начале координат: $G = \{(x_1, x_2) : x_1^2 + x_2^2 < 1\}$;

$$\omega_0(x_1, x_2) = (1 - x_1^2 + x_2^2)(x_1^2 + x_2^2 - 1)^2 + 2;$$

$$\omega_S(t, x_1, x_2) = 0;$$

$$t \in [0, 1], \text{ шаг дискретизации по времени } \tau = 0,1; \|\Phi_{k+1}^{(l_{k+1})}(\mathbf{x}) - \Phi_{k+1}^{(l_{k+1}+1)}(\mathbf{x})\|_{C(\bar{G})} < \varepsilon,$$

$$k = 0, 1, \dots, 9, \varepsilon = 10^{-1}.$$

Значения $\Phi_{k+1}^{(i+1)}(\mathbf{x})$ были вычислены с помощью (3.4) (во всех узлах интегрирования по G). В качестве первого приближения правой части уравнения в (3.2) для каждого временного слоя был выбран лапласиан решения, построенный на предыдущем временном слое:

$$\Delta \Psi_{k+1}^{(1)}(\mathbf{x}) = \Delta \Psi_k(\mathbf{x}), k = 0, 1, \dots, 9,$$

где

$$\Delta \Psi_k(\mathbf{x}) = \Delta \left(\Psi_k^{(l_k)}(\mathbf{x}) \right)_N = \Phi_k^{(l_k)}(\mathbf{x}), \|\Phi_k^{(l_k)}(\mathbf{x}) - \Phi_k^{(l_k+1)}(\mathbf{x})\|_{C(\bar{G})} < \varepsilon, k = 1, \dots, 9.$$

Приближенное решение (3.1) (см. (3.6)) в данном случае имеет вид:

$$\Psi_{k+1}(\mathbf{x}) \approx \frac{1}{A} \left[- \int_G \Phi_{k+1}^{(l_{k+1})}(\mathbf{y}) \ln \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} d\mathbf{y} - \int_{\Sigma} \left(\sum_{j=1}^{40} \zeta_j^{(k+1)} \beta_j(\mathbf{y}) \right) \frac{\partial}{\partial n_y} \ln \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} d\mathbf{s}_y \right], \quad (5.1)$$

где $k = 0, 1, \dots, 9$, $|\mathbf{x}^j| = 1, 2, j = 1, 2, \dots, 40$.

Графики построенного приближенного (5.1) решения задачи (1.3) для различных моментов времени приведены на рис. 4-7. Норма в $C(\bar{G})$ невязки имеет порядок 10^{-2} .

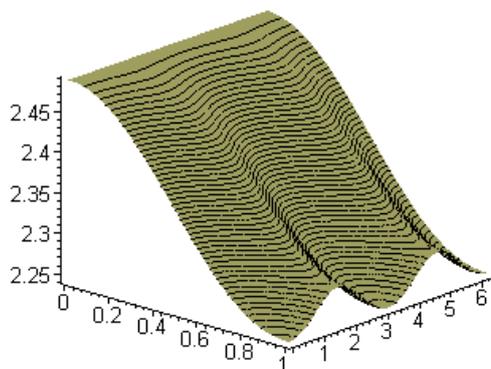


Рис. 4. Приближенное решение задачи 2 для $t=0,1$
(Количество итераций: 6; норма в $C(\bar{G})$ невязки: 0,09)

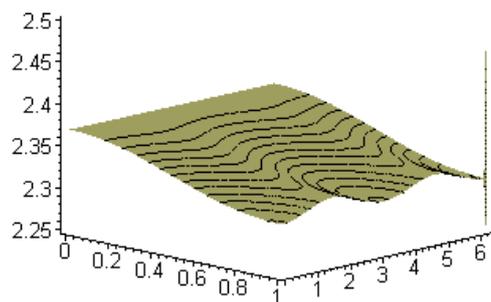


Рис. 5. Приближенное решение задачи 2 для $t=0,2$
(Количество итераций: 7; норма в $C(\bar{G})$ невязки: 0,06)

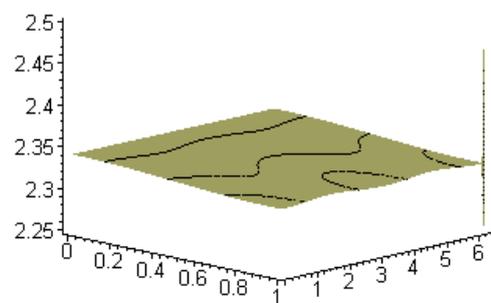


Рис. 6. Приближенное решение задачи 2 для $t=0,3$
(Количество итераций: 4; норма в $C(\bar{G})$ невязки: 0,08)

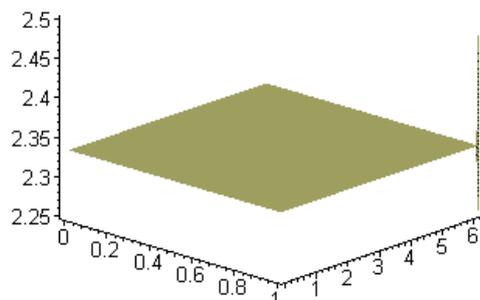


Рис. 7. Приближенное решение задачи 2 для $t=0,4$
(Количество итераций: 2; норма в $C(\bar{G})$ невязки: 0,05)

Выводы

С помощью методики, основанной на дискретизации по времени исходной задачи и методе точечных потенциалов, предложенной в [8], построены приближенные решения нелинейных краевых задач (1.1) и (1.3).

Численные расчеты (см. рисунки 1-3) показывают, что приближенное решение (4.2) задачи (1.1) быстро сходится к точному решению (4.1) на рассматриваемом интервале времени: максимум модуля погрешности порядка 10^{-3} и высокое качественное совпадение решений достигается за 1-2 итерации (причем для относительно большого шага дискретизации по времени: $\tau = 0,1$).

Приближенное решение (5.1) задачи (1.3) также быстро сходится на рассматриваемом интервале времени: максимум модуля невязки порядка 10^{-2} достигается за 2-7 итераций ($\tau = 0,1$).

ЛИТЕРАТУРА

1. Бретшнайдер С. Свойства газов и жидкостей. Инженерные методы расчета / С. Бретшнайдер. – М.-Л.: Химия, 1966. – 535 с.
2. Шервуд Т. Массопередача / Т. Шервуд. – М.: Химия, 1982. – 695 с.
3. Полянин А.Д., Зайцев, В.Ф. Справочник по нелинейным уравнениям математической физики / А.Д. Полянин. – М.: Физматлит, 2002. – 432 с.
4. Годунов С.К. Уравнения математической физики / С.К. Годунов. – М.: Наука, 1979 – 391 с.
5. Полубаринова-Кочина П.Я. Теория движения грунтовых вод / П.Я. Полубаринова-Кочина. – М.: Наука, 1977. – 664 с.
6. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уральцева, Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа / О.А. Ладыженская. – М.: Наука, 1967. – 736 с.
7. Калиткин Н.Н. Численные методы / Н.Н. Калиткин. – М.: Наука, 1978. – 512 с.

8. Захаров М.Ю., Семенчин Е.А. Построение приближенного решения краевой задачи, описывающей рассеяние примеси в атмосфере, методом точечных потенциалов // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2009. № 4. с. 20-27 .
9. Захаров М.Ю. О построении приближенного решения плоской задачи Дирихле для уравнения Пуассона методом точечных потенциалов. / М.Ю. Захаров, Е.А. Семенчин // Обзорные прикладной и промышленной математики. – 2009. – Т.16. – ВВ.3. – С. 463-464.
10. Ладыженская О.А., Уральцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения эллиптического типа / О.А. Ладыженская. – М.: Наука, 1973. - 576 с.
11. Захаров М.Ю. Обратная задача определения плотности логарифмического потенциала двойного слоя и применение к решению краевой задачи // Численный анализ: теория, приложения, программы. М.: МГУ, 1999. С. 113-120.

**CONSTRUCTING THE APPROXIMATE SOLUTIONS OF THE
TWO-DIMENSIONAL BOUNDARY PROBLEMS WITH THE
NONLINEAR EQUATION OF DIFFUSION IN THE ISOTROPIC ENVIRONMENT**

M. Zaharov,* E. Semenchin*

* *Open Society «Research-and-production association « Promavtomatika» (Krasnodar)*

** *Kuban State University, Krasnodar*

Abstract. In article the first and second two-dimensional boundary problems for the diffusion equation in the isotropic environment with coefficient (of diffusion) depending on concentration are considered. Construction of the numerical solution of such problems is interfaced to great difficulties. The technique based on discretization of initial problems on time variable and iterative process of construction for each considered moment of time of approximate solutions of auxiliary linear problems is used. The approximate solutions of auxiliary problems are under construction the method of basic potentials. With the help of this technique are constructed approximate solutions of considered nonlinear problems. The general view of these approximate solutions is reduced. On concrete examples convergence of approximate solutions of the problems to the exact is shown.

Key words: the method of basic potentials, boundary problems with the nonlinear equations, the diffusion in the isotropic environment.

УДК 519.635, 532.5.032

**ОБ ОДНОМ СПОСОБЕ ОСРЕДНЕНИЯ УРАВНЕНИЙ
СЖИМАЕМОЙ И НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ****Н.М. Евстигнеев***Институт системного анализа РАН, Москва*

Аннотация. В данной статье предложена схема осреднения уравнений движения вязкой сжимаемой и несжимаемой Ньютонической жидкости, позволяющая получить замкнутую систему уравнений для осредненных и флюктуационных составляющих термогидродинамических функций не связанных с размерами сетки, в отличие от LES. Предложен способ численного интегрирования полученных систем уравнений. Работа поддержана Российским Фондом Фундаментальных Исследований (гранты 08-07-00074а и 09-07-00078а).

Ключевые слова: осреднение, турбулентность, вычислительная гидродинамика.

1. Введение

В настоящее время в области промышленной вычислительной аэрогидродинамики наблюдается тенденция использования моделей динамики крупных вихрей (LES – моделирование) для получения детальной картины турбулентного течения, например [1,2], в которых применяется произвольное “малое” пространственно-временное осреднение, часто связанное с размерами расчетной дискретной сетки. Применение данной методики позволяет провести численный эксперимент и получить достаточно точные значения, которые уже после обрабатываются с привлечением осреднения по О. Рейнольдсу с целью получения статистических характеристик течения (средние значения функций, моменты первого и второго порядка, ковариации и т.д). Отрицательной стороной применения данного подхода является дорогостоящие расчеты и использование значительного машинного времени для больших моделей. Применение осредненных уравнений по Рейнольдсу (RANS – моделирование), замыкаемых какой-либо моделью турбулентности, построенных на полуэмпирической теории (на практике, чаще всего k-ε моделью и аналогами), позволяет значительно сократить машинное время расчета и требуемую оперативную память, но при этом может приводить к парадоксальным результатам в сложных задачах, например, при расчете течений в областях особых точек или закрученных течений [2,5].

В настоящей статье предлагается альтернативный подход, который, с одной стороны, сокращает требуемую оперативную память и машинные ресурсы, а, с другой, - позволит повысить точность расчетов по сравнению с RANS-методами.

2. Постановка задачи осреднения

Как известно, осреднение по О. Рейнольдсу выполняется так, что актуальные значения термогидродинамических функций f представляются в виде осредненных по вре-

мени \bar{f} и пульсационных f' величин, таких, что \bar{f} не зависит от f' при $t_0 \rightarrow \infty$ [3]:

$$f = \bar{f} + f', \quad \bar{f} = \frac{1}{t_0} \int_{t-t_0}^t f d\tau, \quad \overline{f'} = \frac{1}{t_0} \int_{t-t_0}^t f' d\tau = 0, \quad (1)$$

где t – текущее время, t_0 – время (период) осреднения.

Введем нелинейный дифференциальный оператор \mathfrak{R} , являющийся оператором уравнения Навье-Стокса над термогидродинамической функцией $f \in R^n$. В силу нелинейности \mathfrak{R} , при применении его на уравнения сохранения импульса и энергии возникают дополнительные пульсационные напряжения, тепловые и диффузионные потоки, вида:

$$\overline{\mathfrak{R}\{f' \dots\}} = \frac{1}{t_0} \int_{t-t_0}^t \mathfrak{R}\{f' \dots\} d\tau, \quad (2)$$

определение которых и составляет проблему замыкания уравнений для осредненных функций. В отличие от полуэмпирических теорий, где $\overline{\mathfrak{R}\{f' \dots\}}$ выражается с помощью коэффициентов вязкости или моментов различного порядка, в данной работе предлагается иной подход к осреднению.

По формуле правого прямоугольника [4] с точностью $0(t_0^2)$, получим:

$$\overline{\mathfrak{R}\{f' \dots\}} = \mathfrak{R}\{f'(x_i, t) \dots\} - \frac{1}{2} t_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathfrak{R}\{f'(x_i, t) \dots\} + 0(t_0^2), \quad i=1,2,3. \quad (3)$$

Данная зависимость (3) позволяет замкнуть систему уравнений для осредненных функций с помощью уравнений для пульсаций. Рассмотрим дифференциальный оператор \mathfrak{R} на случай несжимаемой и сжимаемой жидкости.

3. Несжимаемая жидкость

Итак, для случая несжимаемой жидкости \mathfrak{R} представлен уравнениями сохранения массы и импульса. Уравнения переноса тепла и примеси могут быть получены аналогично:

$$\sum_j \frac{\partial V_j}{\partial x_j} = 0, \quad \rho \frac{\partial V_i}{\partial t} + \sum_j \rho V_j \frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial P}{\partial x_i} = \mu \nabla^2 V_i + \rho F_i, \quad j=1,2,3. \quad (4)$$

Здесь ρ - плотность жидкости, V – скорость, P – давление, F – проекция внешней силы, μ - динамическая вязкость (коэффициент вязкости деформаций сдвига).

Применим (1) к (4):

$$\sum_j \frac{\partial \bar{V}_j}{\partial x_j} = 0, \quad \rho \frac{\partial \bar{V}_i}{\partial t} + \sum_j \rho \bar{V}_j \frac{\partial \bar{V}_i}{\partial x_j} + \sum_j \overline{\frac{\partial \rho V_j V_i}{\partial x_j}} + \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} = \mu \nabla^2 \bar{V}_i + \rho \bar{F}_i. \quad (5)$$

Под несжимаемой жидкостью понимается такая, что $\rho' = 0$ и $\rho = \bar{\rho} = const$.

Вычитая (5) из (4) получим:

$$\sum_j \frac{\partial V'_j}{\partial x_j} = 0, \quad \rho \frac{\partial V'_i}{\partial t} + \sum_j \rho \left(\bar{V}_j \frac{\partial V'_i}{\partial x_j} + V'_j \frac{\partial V'_i}{\partial x_j} + V'_j \frac{\partial \bar{V}_i}{\partial x_j} \right) - \sum_j \frac{\partial \rho V'_j V'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial P'}{\partial x_i} = \mu \nabla^2 V'_i + \rho F'_i. \quad (6)$$

Корреляции вида (2), входящие в (5) и (6) осредняются с помощью (3). В результате получим замкнутую систему:

$$\begin{aligned} \sum_j \frac{\partial \bar{V}_j}{\partial x_j} &= 0, \\ \rho \frac{\partial \bar{V}_i}{\partial t} + \rho \sum_j \left[\bar{V}_j \frac{\partial \bar{V}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V'_i V'_j}{\partial x_j} - \frac{1}{2} t_0 \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial V'_i V'_j}{\partial t} \right] + \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} &= \mu \nabla^2 \bar{V}_i + \rho \bar{F}_i; \end{aligned} \quad (7a)$$

$$\begin{aligned} \sum_j \frac{\partial V'_j}{\partial x_j} &= 0, \\ \rho \frac{\partial V'_i}{\partial t} + \rho \sum_j \left[\bar{V}_j \frac{\partial V'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V'_i \bar{V}_j}{\partial x_j} + \frac{1}{2} t_0 \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial V'_i V'_j}{\partial t} \right] + \frac{\partial P'}{\partial x_i} &= \mu \nabla^2 V'_i + \rho F'_i. \end{aligned} \quad (7b)$$

Совместно с корректными граничными и начальными условиями, (7) позволяет получить замкнутую систему дифференциальных уравнений для нахождения осредненных и пульсационных значений термогидродинамических величин с точностью $0(t_0^2)$. Понятно, что чем меньше t_0 , тем точнее расчет, и тем сильнее система (7) стремится к прямому численному моделированию.

4. Сжимаемая жидкость

Теперь рассмотрим дифференциальный оператор \mathfrak{R} на случай сжимаемой жидкости. Здесь \mathfrak{R} представлен уравнениями сохранения массы, количества движения и энергии. Поскольку используется консервативная форма исходных уравнений, введем поток единицы массы в виде $\rho \cdot V_i = \phi_i$. Газ предполагается политропным, теплопроводным, давление связывается через плотность с помощью уравнения состояния (9):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial \phi_j}{\partial x_j} &= 0, \\ \frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial \phi_j V_j}{\partial x_j} + \frac{\partial P}{\partial x_i} &= \sum_j \frac{\partial \Theta_{ij}}{\partial x_j} + \rho F_i, \\ \frac{\partial e}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial V_j (e + P/\rho)}{\partial x_j} &= \sum_j \frac{\partial V_j \Theta_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} k \frac{\partial T}{\partial x_i} + \eta, \\ \Theta_{ij} &= \mu \left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i} - \lambda \delta_{ij} \sum_k \frac{\partial V_k}{\partial x_k} \right); \quad k=1,2,3; \end{aligned} \quad (8)$$

$$P = (\gamma - 1) (e - 1/2 \cdot \sum_j \rho V_j^2). \quad (9)$$

Здесь: Θ_{ij} - тензор вязких напряжений; e – полная энергия; $(e + P/\rho)$ - энтальпия; η - источниковый член, отвечающий за генерацию тепла; λ - коэффициент объемной вязкости, для гипотезы Дж. Стокса, равный $2/3$; δ_{ij} - символ Кронекера. Аналогично с несжимаемой жидкостью, применим (1) к (8):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial \bar{\phi}_j}{\partial x_j} &= 0, \\ \frac{\partial \bar{\phi}_i}{\partial t} + \sum_j \left[\frac{\partial \bar{\phi}_i \bar{V}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{\phi}_i' \bar{V}_j'}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} &= \sum_j \frac{\partial \bar{\Theta}_{ij}}{\partial x_j} + \bar{\rho} \bar{F}_i + \bar{\rho}' \bar{F}'_i, \\ \frac{\partial \bar{e}}{\partial t} + \sum_j \left[\frac{\partial \bar{V}_j (e + P/\rho)}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{V}_j' (e + P/\rho)'}{\partial x_j} \right] &= \sum_j \left[\frac{\partial \bar{V}_i \bar{\Theta}_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{V}_i' \bar{\Theta}'_{ij}}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} k \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} + \bar{\rho} \bar{\eta} + \bar{\rho}' \bar{\eta}', \\ \Theta_{ij} &= \mu \left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i} - \lambda \delta_{ij} \sum_k \frac{\partial V_k}{\partial x_k} \right). \end{aligned} \quad (10)$$

Для сокращения объема записи предположим стационарность внешней силы F и источникового члена генерации тепла η . Вычитая (10) из (8), получим систему уравнений для флюктуационных составляющих:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho'}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial \phi'_j}{\partial x_j} &= 0, \\ \frac{\partial \phi'_i}{\partial t} + \sum_j \left[\frac{\partial \phi'_i V'_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \phi'_i \bar{V}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{\phi}_i V'_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{\phi}_i' V'_j}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial P'}{\partial x_i} &= \sum_j \frac{\partial \Theta'_{ij}}{\partial x_j}, \\ \frac{\partial e'}{\partial t} + \sum_j \left[\frac{\partial V'_j (e + P/\rho)'}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{V}_j' (e + P/\rho)'}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{V}_j (e + P/\rho)'}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{V}_j' (e + P/\rho)'}{\partial x_j} \right] &= \\ &= \sum_j \left[\frac{\partial V_i \Theta'_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{V}_i \bar{\Theta}_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{V}_i \Theta'_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{V}_i' \bar{\Theta}'_{ij}}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} k \frac{\partial T'}{\partial x_i}, \\ \Theta'_{ij} &= \mu \left(\frac{\partial V'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V'_j}{\partial x_i} - \lambda \delta_{ij} \sum_k \frac{\partial V'_k}{\partial x'_k} \right). \end{aligned} \quad (11)$$

Система (10) и (11) дополняется уравнением состояния (9), соответственно, для осредненных и флюктуационных термогидродинамических переменных. Применяя (3) к виртуальным напряжениям вида (2) в (10) и (11) получим замкнутую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial \bar{\phi}_j}{\partial x_j} &= 0, \\ \frac{\partial \bar{\phi}_i}{\partial t} + \sum_j \left[\frac{\partial \bar{\phi}_i \bar{V}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \phi'_i V'_j}{\partial x_j} - \frac{1}{2} t_0 \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \phi'_i V'_j}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} &= \sum_j \frac{\partial \bar{\Theta}_{ij}}{\partial x_j} + \bar{\rho} \bar{F}_i, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{e}}{\partial t} + \sum_j \left[\frac{\partial \bar{V}_j(e+P/\rho)}{\partial x_j} + \frac{\partial V'_j(e+P/\rho)'}{\partial x_j} - \frac{1}{2} t_0 \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial V'_j(e+P/\rho)'}{\partial x_j} \right] = \\ = \sum_j \left[\frac{\partial \bar{V}_i \bar{\Theta}_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial V'_i \Theta'_{ij}}{\partial x_j} - \frac{1}{2} t_0 \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial V'_i \Theta'_{ij}}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} k \frac{\partial T}{\partial x_i} + \bar{\rho} \eta, \\ \Theta_{ij} = \mu \left(\frac{\partial \bar{V}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{V}_j}{\partial x_i} - \lambda \delta_{ij} \sum_k \frac{\partial \bar{V}_k}{\partial x_k} \right); \end{aligned} \quad (12a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho'}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial \phi'_j}{\partial x_j} = 0, \\ \frac{\partial \phi'_i}{\partial t} + \sum_j \left[\frac{\partial \phi'_i \bar{V}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \phi'_i V'_j}{\partial x_j} + \frac{1}{2} t_0 \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \phi'_i V'_j}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial P'}{\partial x_i} = \sum_j \frac{\partial \Theta'_{ij}}{\partial x_j}, \\ \frac{\partial e'}{\partial t} + \sum_j \left[\frac{\partial V'_j(e+P/\rho)}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{V}_j(e+P/\rho)'}{\partial x_j} + \frac{1}{2} t_0 \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial V'_j(e+P/\rho)'}{\partial x_j} \right] = \\ = \sum_j \left[\frac{\partial V'_i \bar{\Theta}_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{V}_i \Theta'_{ij}}{\partial x_j} + \frac{1}{2} t_0 \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial V'_i \Theta'_{ij}}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} k \frac{\partial T'}{\partial x_i}, \\ \Theta_{ij} = \mu \left(\frac{\partial V'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V'_j}{\partial x_i} - \lambda \delta_{ij} \sum_k \frac{\partial V'_k}{\partial x_k} \right). \end{aligned} \quad (12b)$$

Система уравнений (12) позволяет совместно с (9) и корректными начальными и граничными условиями однозначно определить осредненные и флуктуационные термодинамические переменные для случая теплопроводного совершенного газа с точностью $O(t_0^2)$, как и для случая несжимаемой жидкости.

Необходимо отметить, что для интегрирования исходных уравнений необходимо перейти к безразмерным переменным, при этом, кроме известных критериев подобия (числа Sh, Re, M, Fr, Eu, Gr, Pr, Nu и др), необходимо ввести еще один критерий, связанный с используемым осреднением (3), вида t_0/t , где t – характерный масштаб времени. Тогда дополнительный критерий будет являться зависимым от числа Струхалия в виде $\frac{t_0 \cdot Sh \cdot V}{L}$.

5. Заключение.

Системы (7) и (12) могут быть проинтегрированы только численно. При интегрировании полученных систем уравнений не требуется привлечение дополнительных приемов, заметно усложняющих процесс численного интегрирования. Для этой цели подходят методы, применяемые к исходным, неосредненным уравнениям, с рядом оговорок.

Для системы уравнений (7) несжимаемой жидкости необходимо решать сингулярно-возмущенную задачу для давления с целью согласования полей скорости и давления при $M \rightarrow 0$. Для этой цели наиболее распространенные алгоритмы (например SIMPLE, PISO и др [6]), которые приводят в той или иной степени к решению уравнения Пуассона для поправки к давлению на каждом шаге по времени являются неэкономными, т.к. исходные системы будут содержать по два таких уравнения и их обращения приведет к заметному увеличению расхода оперативной памяти и машинного времени. По-

этому, наиболее приемлемым методом для решения уравнения Пуассона в данном случае являются многосеточные методы, на пример [7].

Для систем (7) и (12) крайне важно выполнение балансовых соотношений в сеточном пространстве, для чего целесообразно применить метод конечного объема наряду с привлечением нелинейных противопотоковых схем повышенной точности (например, в концепции TVD).

В настоящее время для решения систем уравнений (7) и (12) использован программный комплекс, основанный на метод конечного объема на неортогональной несвязанной сетке тетраэдров [8]. Получены результаты, подтверждающие правомерность использования предложенного осреднения для ряда классических задач – течение Пуазейля, течения Гогена-Пуазейля, течение Куэтта между двумя цилиндрами, рециркуляционное течение в каверне. Результаты готовятся к публикации.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Moin P., Mahesh K.* Direct Numerical Simulation: a tool in turbulence research. // Annu. Rev. Fluid Mech. №30, pp.539-578, 1998.
2. *Hoffman J., Johnson C.* Adaptive DNS/LES: a New Agenda in CFD. // Chalmers university of technology. Preprint №23, Sweden, 2003.
3. *Монин А.С., Яглом А.М.* Статистическая гидромеханика. Ч1,2. - М.: Наука, 1965, 1967г.
4. *Демидович Б.П., Марон И.А., Шувалова Э.З.* Численные методы анализа. - М.: Наука, 1967г.
5. *Фрик П.Г.* Турбулентность: подходы и модели. - Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003г.
6. *Флетчер К.* Вычислительные методы в динамике жидкостей. Ч.1,2.- М.: Мир, 1991г.
7. *Евстигнеев Н.М.* Интегрирование уравнения Пуассона..// Вычислительные методы и программирование, Т10, стр. 268-274, 2009г.
8. *Евстигнеев Н.М.* Интегрирование трехмерных уравнений..// Вычислительные методы и программирование, Т8, стр. 252-264, 2007г.

ABOUT ONE AVERAGING METHOD OF THE EQUATIONS OF A COMPRESSIBLE AND INCOMPRESSIBLE LIQUID

N. Evstigneev

Institute for System Analysis, RAS, Moscow

Abstract. This paper proposes a method of averaging for compressible and incompressible Newtonian fluid dynamics equations. This method derives new set of equations for averaged and fluctuating variables with the closed chain of equations for the given averaging scale. This scale is not related with the mesh size, hence the computational procedure is much cheaper than the LES method. Numerical method for the derived equations is proposed. The work is supported by RFFI grants 08-07-00074a and 09-07-00078a.

Key Words: averaging, turbulence, computational fluid dynamics.

УДК 519:532

**О СТАБИЛИЗАЦИИ СЕТОЧНОГО МЕТОДА БОЛЬЦМАНА
ДЛЯ ВЫСОКИХ ЧИСЕЛ РЕЙНОЛЬДСА ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ
ТУРБУЛЕНТНОГО РЕЖИМА ТЕЧЕНИЯ ЖИДКОСТИ**

Н.М. Евстигнеев

Институт системного анализа РАН, Москва

Аннотация. В работе рассматривается стабилизация сеточного метода Больцмана при стремлении числа Рейнольдса к бесконечности (исчезающе малой вязкости). Анализируется поведение алгоритма и устойчивость различных шагов метода расщепления для алгоритма stream and collide. Вводится локальное ограничение на отклонение энтропии функции распределения частицы от равновесного состояния. Ограничитель аналогичен применению метода TVD в классической вычислительной гидродинамике. Проводится анализ получаемых решений на модельной двумерной геометрии класса D2Q9. Работа поддержана Российским Фондом Фундаментальных Исследований (гранты 08-07-00074а и 09-07-00078а).

Ключевые слова: сеточный метод Больцмана, численное моделирование в гидродинамике, турбулентное течение.

1. Введение.

В настоящее время объем публикаций, связанный с работами по сеточному методу Больцмана (СМБ) значительно увеличился в связи с относительной простотой реализации кода и отличным потенциалом для распараллеливания начально-краевых задач. Основным недостатком СМБ является потеря устойчивости решения при моделировании турбулентных потоков (число Рейнольдса $R \rightarrow \infty$) с малой вязкостью. Для предотвращения данного недостатка в основном либо вводят искусственную схемную вязкость, которая значительно демпфирует и “размазывает” решение при $R \rightarrow \infty$ [1] либо применяют итерационные подходы, которые значительно замедляют процесс решения и лишают СМБ привлекательности, связанной с локальностью функций распределения [2]. Представляется важным проанализировать основу потери устойчивости метода и изменить сам метод, не теряя в вычислительной производительности алгоритма и локальности функции распределения.

2. Исходные уравнения Больцмана.

Пусть задана вероятностная функция распределения одной частицы (PPDF) $f(r, e, t)$, такая, что выражение $[f(r, e, t) \cdot d^3 r \cdot d^3 e]$ представляет собой количество частиц в момент времени t внутри фазового объема $[d^3 r \cdot d^3 e]$ в окрестности r и e , где r – координаты в физическом пространстве, e – скорость частицы. Тогда эволюция PPDF будет описываться уравнением вида:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + e \cdot \nabla_r + a \cdot \nabla_e \right) f(r, e, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}, \quad (1)$$

где a – внешняя сила, действующая на частицу, $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$ – член уравнения, отвечающий за соударения частиц.

Уравнение (1) переводится к форме, введенной Больцманом, если в (1) ввести следующие предположения: 1) Рассматриваются только бинарные соударения (т.е. среда достаточно разрежена). 2) Скорость частицы не связана с ее местоположением (предположение молекулярного хаоса). 3) Пристеночные эффекты не влияют на соударение. 4) Внешние силы a не влияют на интеграл дифференциального сечения соударения.

3. Вывод уравнения Больцмана с ВГК оператором соударения. Гидродинамическое приближение.

Если система находится в околоравновесном положении, то интеграл $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$ может быть значительно упрощен. В соответствии с теорией интервальных соударений [3] можно сказать, что за временной интервал δt часть частиц, определяемая как $\delta t / \tau = 1 / \tau^*$ (τ – время релаксации), в заданном малом объеме подвергаются соударениям и при этом их PPDF f переходят в равновесное состояние $f^{(0)}$, определяемое распределением Максвелла:

$$f^{(0)} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D_0/2}} \exp\left[-\frac{(e-U)^2}{2RT}\right]. \quad (2)$$

Здесь D_0 , R , T , ρ , U – размерность пространства, универсальная газовая постоянная, температура, макроскопические плотность и скорость. Введя (2), интеграл соударения можно переписать в приближении Бхатнагара-Гросса-Крука (ВГК) как:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = -\frac{f - f^{(0)}}{\tau} = -\frac{f - f^{(0)}}{\delta t \cdot \tau^*}. \quad (3)$$

Для выражения силового взаимодействия вводится предположение, что $\nabla_e f \approx \nabla_e f^{(0)}$ и тогда (1) переписывается как:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + e \cdot \nabla_r f = -\frac{f - f^{(0)}}{\tau} + \frac{a \cdot (e - U)}{RT} f^{(0)}. \quad (4)$$

Связь между микроскопической характеристикой частицы (PPDF) и макроскопическими характеристиками среды в случае гидродинамического приближения выполняется путем интегрирования f по фазовому объему, на пример:

$$\rho = \int [f] de; \quad \rho U = \int [f \cdot e] de; \quad \rho \varepsilon = 0.5 \int [(e - U)^2 f] de. \quad (5)$$

Рассматривая процесс эволюции (4) при малом числе Кнудсена:

$$\varepsilon = \lambda / L \leq 0.1, \quad (6)$$

и малых значениях скорости при постоянной температуре (малое число Маха) можно применить разложение Чапмена-Энскога [4] переписав (2) как:

$$f^{(0)} = \frac{\rho \cdot \exp\left[-\frac{(e-U)^2}{2RT}\right]}{(2\pi RT)^{D_0/2}} \cdot \left(1 + \frac{e \cdot U}{RT} + \frac{(e \cdot U)^2}{2(RT)^2} - \frac{U^2}{2RT}\right) + O(U^3), \quad (7)$$

И применив (4) можно получить следующее гидродинамическое приближение для нулевых и первых моментов разложения для PPDF по числу Кнудсена:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U) = 0; \quad \frac{\partial(\rho U)}{\partial t} + (U \cdot \nabla)\rho U + \nabla(\rho RT) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\eta \frac{\partial U_i}{\partial x_i} - \eta \frac{2}{3} \nabla \cdot U \right), \quad (8)$$

где $\eta = \varepsilon \rho RT$ - аналог динамической вязкости. Очевидно, что при определенном выборе $R \cdot T$ уравнения (8) переходят в уравнения Навье-Стокса для слабосжимаемой жидкости с уравнением состояния вида $P = \rho RT$, что при введенных предположениях о постоянной температуре приведет к модельным уравнениям искусственной сжимаемости, аналогичным модели Черина.

4. Уравнения и алгоритм сеточного метода Больцмана.

Одним из эффективных методов решения (4) является применение дискретных клеточных автоматов, подобно моделям упрощенной микродинамики текучих сред [6]. Исторически “классический” Сеточный Метод Больцмана стал эмпирическим продолжением идеи молекулярных газовых автоматов [6], но в отличие от последних использует прямоугольные сетки. Здесь не останавливаемся на реализации алгоритма, более детально с.м. [4]. Аппроксимация (4) на сеточном шаблоне записывается так, чтобы тождественно выполнялись интегралы (5). Не останавливаясь детально на методе дискретизации, запишем уравнение переноса и соударения сеточного метода Больцмана для ячейки геометрии D2Q9, для классификации ячеек и процедуры построения дискретизации с.м. [2,4]:

$$\frac{\partial f_q}{\partial t} + e_q \cdot \nabla_x f_q = -\frac{f_q - f_q^{(0)}}{\tau} + \frac{a \cdot (e_q - U)}{RT} f_q^{(0)}. \quad (9)$$

5. Анализ устойчивости алгоритма и способов его стабилизации.

Основной (и практически единственный) метод расчета уравнения (9) вытекает явно из его структуры – это метод расщепления по физическим процессам. В зарубежной литературе, он получил наименование “распространение и соударение”. Математически это приводит к разбиению начально-краевой задачи для $f_q(x, t)$ (9) на два вида уравнений:

Уравнение конвективного переноса:

$$\frac{\partial f'_q}{\partial t} + e_q \cdot \nabla_x f'_q = 0, \quad (10)$$

и уравнение соударения:

$$\frac{\partial f_q}{\partial t} = -\frac{f'_q - f_q^{(0)}}{\tau} + \frac{a \cdot (e_q - U)}{RT} f_q^{(0)}. \quad (11)$$

Рассмотрим отдельно методы решения (10) и (11), возможные сложности и ограничения.

Решение начально-краевой задачи для (10) в общем случае приводит к классическому уравнению конвективного переноса. В алгоритме “stream and collide” используется явная схема по времени. Легко показать, что применение явной противопоточной схемы к (10) дает:

$$f_q(x, t + \Delta t) - f_q(x, t) = -CFL(af_q(x + \Delta x, t) + bf_q(x, t) + cf_q(x - \Delta x, t)), \quad (12)$$

что при выборе единичных величин для скоростей e_q , размеров ячейки Δx и шага по времени Δt определяет $CFL=1$. Численная схема (12) обладает схемной вязкостью, равной $1/2$ для $CFL=1$. Ее компенсация возможна на втором шаге схемы расщепления, для чего параметр релаксации уменьшается на $1/2$.

Очевидно, что при выборе отличных от единичных параметров дискретизации Δx , Δt и e_q , либо будет увеличиваться схемная вязкость (при $CFL < 1$), либо численная схема станет неустойчивой (при $CFL > 1$), что является достаточно сильным ограничением. Для преодоления данного препятствия вводится неявная схема, на пример вида:

$$f_q(x, t + \Delta t) = \frac{f_q(x, t) - \frac{1}{2} \Delta t \left((e_q - |e_q|) \cdot \frac{f_q(x + \Delta x, t) - f_q(x - \Delta x, t)}{\Delta x} - (e_q + |e_q|) \cdot \frac{f_q(x - \Delta x, t) - f_q(x + \Delta x, t)}{\Delta x} \right)}{1 - \Delta t(e_q - |e_q|)/2\Delta x + \Delta t(e_q + |e_q|)/2\Delta x}. \quad (14)$$

Поскольку знаменатель всегда строго больше или равен 1, возмущения в (14) будут затухать. Но при этом оптимальное значение числа Куранта–Фридрихса–Леви, при котором схемная вязкость минимальна, будет составлять $CFL=1$.

Для решения (14) можно применять как метод прогонки, так и итерационную схему, которая быстро сходится при $CFL < (5-6)$. В связи с тем, что скорости e_q лежат в пределе ± 1.0 то проблем с немонотонностью не возникает, поэтому к рассматриваемому методу можно не применять алгоритм сохранения полной вариации.

Уравнение (11) относится к типу жесткого дифференциального уравнения, которое при линеаризации $f_q^{(0)}$ имеет аналитическое решение вида (для простоты и далее $a = 0$):

$$f_q = \exp \left(-\frac{t}{\tau} \left(f_q|_0 - \bar{f}_q^{(0)} \left(1 + e^{\left(\frac{t}{\tau} \right)} \right) \right) \right), \quad (15)$$

где $f_q|_0$ - начальное значение PPDF, $\bar{f}_q^{(0)}$ - линеаризованная функция равновесного распределения.

Из (15) очевидно, что для решения (11) необходимо применять численные схемы для решения жестких дифференциальных уравнений. В стандартном алгоритме “stream and collide” используется стандартная схема Эйлера с разностями назад. Для устойчивого решения (11) необходимо применять специальные численные методы решения жестких систем, на пример DUMKA, разработанные В.И.Лебедевым с соавторами [5].

Очевидно, что в уравнениях (8) аналог кинематической вязкости будет иметь форму $\nu = \varepsilon C_s^2$, поскольку, вводя значение характерной скорости время релаксации можно определить как $\tau = U_0 / \lambda$, по (3) $\tau = \Delta t \tau^*$, а число Кнудсена определяется по (6), то тогда:

$\nu = \tau^* C_s^2 \Delta t$, и с учетом компенсации схемной вязкости для (12), кинематическая вязкость определяется как:

$$\nu = (\tau^* - 1/2) C_s^2 \Delta t. \quad (16)$$

Для различных ячеек C_s будет разной, и, следовательно, формула для определения кинематической вязкости по (16) будет справедлива до константы. Так для ячейки D2Q9:

$$\Delta t = \frac{(\tau^* - 1/2) \Delta x^2}{3\nu}, \text{ в безразмерном виде } \Delta t = \frac{(\tau^* - 1/2) \Delta x^2}{3} R \text{ или:}$$

$$\frac{3\Delta t}{R\Delta x^2} + \frac{1}{2} = \tau^*, \quad (17)$$

где $R = UL / \nu$.

При сохранении физического приближения гидродинамики (8) необходимо строгое выполнение (5), поскольку все постоянные в (17) определяются из условия разложения Чэпмена-Энскога для уравнения (4), при этом можно варьировать двумя параметрами для сохранения равенства (17):

1. При фиксированном CFL и R изменять τ^* . Очевидно, что при $R \rightarrow \infty$, время релаксации $\tau^* \rightarrow 1/2$. При этом из (15) понятно, что такая система будет жесткой и необходимо прибегать к специальным методам решения таких систем т.к. стандартный алгоритм “stream and collide” будет неустойчив.
2. При фиксированном R и $\tau^* > 1 = const$ уменьшать Δx . Это приведет к значительным затратам машинного времени и ресурсов при вычислении турбулентных течений поскольку $\Delta x = 1 / N$, где N – количество дискретных элементов разбиения. Этот вариант рассматривается только для достаточно умеренных чисел Рейнольдса, особенно для двумерных ($\Delta x^2 = \Delta x \Delta y$) трехмерных ($\Delta x^2 = \Delta x \Delta y \Delta z$) течений.

Для моделирования реальных турбулентных течений необходимо проанализировать причины неустойчивого поведения (11) при $\tau^* \rightarrow 1/2$ и добиться устойчивого поведения (11) при $R \rightarrow \infty$. При этом приближение гидродинамики (5) и его условие (17) должны выполняться. Причины неустойчивого поведения системы можно разделить следующим образом.

1. Отрицательное значение f_q . Такое поведение (9) возможно если f_q находится “далеко” от квазиравновесного состояния $f_q^{(0)}$. Под “далеко” понимается такое расстояние в L_∞ , что введенные предположения для получения (2) и (3) не выполняются. Такой механизм потери устойчивости можно проследить, если рассмотреть (15) при $\tau = \Delta t \cdot \tau^* = 1/2$. Тогда при сильном отклонении

$$(f_q|_0 - \bar{f}_q^{(0)}) < 0, \quad (18)$$

возмущения в (23) нарастают экспоненциально. В данном случае выбор схемы типа Адамса-Моултона для (11) не исправит ситуации, поскольку поведение (18) не физично и противоречит введенным предположениям и теореме об энтропии [3].

2. Потеря траектории движения на одном шаге по времени. Пусть в уравнении (9) в начальный момент времени для всех $f_q^n = f_q^{(0)}$. И решение (9) продвинулось на один шаг по времени $\Delta t = 1$ как $f_q^{n+1} = L^{-1}(L(f_q^n))$. При $\tau < 1$ попытка решения уравнения (9) с обратным временем для получения начального распределения во всех f_q приведет к отклонению такого распределения от $f_q^{(0)}$, т.е. $f_q^{n+1} \neq f_q^n$.

3. Нелинейность (9). Поскольку выражение (23) линеаризованное около $\bar{f}_q^{(0)}$ только модельное и $f_q^{(0)}(x, t) = F[\sum f_q(r, t)]$, то тогда полная вариация решения TV, определяемая как:

$$TV = \sum_{i \in \mathbb{R}^n} \sup [f_{q_i}(t + \Delta t) - f_{q_i}(t)], \quad (19)$$

будет возрастать со временем. Как известно [8] это приведет к росту возмущений.

На сегодняшний день существуют, кроме перечисленных во введении, два метода решения проблемы неустойчивости. Для решения проблемы 1 в работе [10], предложен достаточно простой способ стабилизации – искусственное возвращение значений f_q в близость к $f_q^{(0)}$ через определенное количество K шагов по времени с тем, чтобы не дать развиться неустойчивости. Условие (19) в явном виде выписать для (9) невозможно, поэтому в [10] $K=1$. Тогда (9) переписывается как (для простоты $a = 0$):

$$\begin{cases} f_q^{n+1} - f_q^n = \frac{f_q^{(0)n} - f_q^n}{\tau^*} - \Delta t \cdot e_q \cdot \nabla_x f_q^n; n - \text{четное} \\ f_q^{n+1} = f_q^{(0)n}; n - \text{нечетное} \end{cases} \quad (20)$$

где n – номер шага по времени. В [10] также показано, что применение схемы (20) полностью снимает не только неустойчивость 1 но и пункты 2 и 3. Для пункта два выпол-

няется интерполяция между $f_q^{(0),n}$ и $f_q^{(0),n+2}$. Третий пункт неустойчивости также исчезает, поскольку

$$\partial \left[\sum_{i \in \mathbb{R}^n} \sup [f_{q_i}(t + \Delta t) - f_{q_i}^{(0)}(t)] - \sum_{i \in \mathbb{R}^n} \sup [f_{q_i}(t + 2\Delta t) - f_{q_i}(t + \Delta t)] \right] / \partial t \leq 0$$

В отличие от (16) схемная вязкость для данной схемы определяется как:

$$\nu = 2(\tau^* - 1)C_s^2 \Delta t, \tag{21}$$

что в соответствии с (21) приводит к $\tau^* \rightarrow 1$ при $R \rightarrow \infty$. Тогда схема (20) имеет предел по числу Рейнольдса по сравнению со схемой (9), что явно видно из условия устойчивости 2.

Второй метод основан на фильтрации уравнений с целью отсекаания мод решений, соответствующих высоким волновым числам, изложен в работе [9]. Не останавливаясь на детальном анализе работы, можно сказать со слов ее авторов, что в [9] полечен стабилизированный СМБ, который не вносит значительную схемную вязкость. Но при этом, как отмечают сами авторы работы [9], остается нерешенным вопрос о типе фильтра (для каждой НКЗ необходимо подбирать свой), о локальности метода, так как фильтр проводит двойное суммирование по всем элементам, и о трудозатратах алгоритма, которые для фильтрации порядка N^2 , где N – количество ячеек, против алгоритма (10)-(11) для которого трудозатраты алгоритма порядка $\text{Const} \cdot N$.

6. Локальная стабилизация алгоритма

Идея стабилизации основывается на использованных ранее методах ограничения полной вариации решения. Но вместо использования ограничения вариации для f используется ограничение отклонения энтропии, такое, которое противоречит теореме об энтропии [3].

Энтропия определяется как:

$$S = - \int f \ln f \cdot d\mathbf{k}^D \cdot d\mathbf{x}^D. \tag{21}$$

Тогда задачей ограничителя является оператор:

$$f_q^{n+1} = \min \left(f_q^n; \arg \max_{f_q} (|S^{(0)} - S|) \right), \tag{22}$$

возвращающий значение PPDF к такому, при котором справедливы предположения (2) и (3).

Для определения отклонение энтропии от равновесного состояния используется расстояние Кульбака-Лейблера $\Delta S = - \int_{-\infty}^{+\infty} f \cdot \ln \left(\frac{f}{f^{(0)}} \right)$, которое для дискретного варианта записи СМБ определяется как:

$$\Delta S = - \sum_q f_q \cdot \ln \left(\frac{f_q}{f_q^{(0)}} \right). \tag{23}$$

Тогда, окончательно, стабилизированный вариант (11) для алгоритма “stream ad collide” определяется как:

$$\begin{cases} f_q^{n+1} - f_q^n = \frac{f_q^{(0)n} - f_q^n}{\tau^*}; f_q^{n+1} < \arg \max_{f_q} (|S^{(0)} - S|)^n \\ f_q^{n+1} = 1/2(f_q^n + f_q^{(0)n}); f_q^{n+1} \geq \arg \max_{f_q} (|S^{(0)} - S|)^n \end{cases} \quad (24)$$

Очевидно, что тогда $TV = \sum_{i \in \mathbb{R}^n} \sup [f_{q_i}(t + \Delta t) - f_{q_i}(t)]$ либо остается постоянной, либо убывает со временем. Таким образом получается полный аналог ограничителя TVD в классической гидродинамике, как например в [9].

7. Оценка вносимой схемной вязкости. Алгоритм. Тестовые задачи.

Схемная вязкость для алгоритма (24) аналогична (16) за исключением тех ячеек, в которых производится ограничение по расстоянию Кульбака-Лейблера, где вязкость можно определить как:

$$\nu = 2(\tau^* - 1/2)C_s^2 \Delta t. \quad (25)$$

Из (25) видно, что в точках коррекции энтропии схемная вязкость метода выше, чем в (17). Целесообразно проанализировать величину вносимой схемной вязкости на решении тестовых задач.

Для этой цели разработан метод “stream and collide”, в котором использованы методы решения (14) и (24) для задачи расщепления. Расчетная двумерная область покрывается системой связанных D2Q9 ячеек. Алгоритм строится следующим образом:
 1) Задаются начальные условия для макроскопических ρ, U и вычисляется $f^{(0)}$ для всей области.
 2) Ставятся граничные условия на всех границах для макроскопических переменных.
 3) Ставятся граничные условия для PPDF.
 4) Рассчитывается расстояние Кульбака-Лейблера по (23).
 5) Рассчитывается интеграл соударения по (24).
 6) Рассчитывается адвективный перенос по (14).
 7) Находятся макроскопические переменные по дискретному аналогу (5).
 8) Если конец расчетного времени не достигнут, переходим на шаг 2.

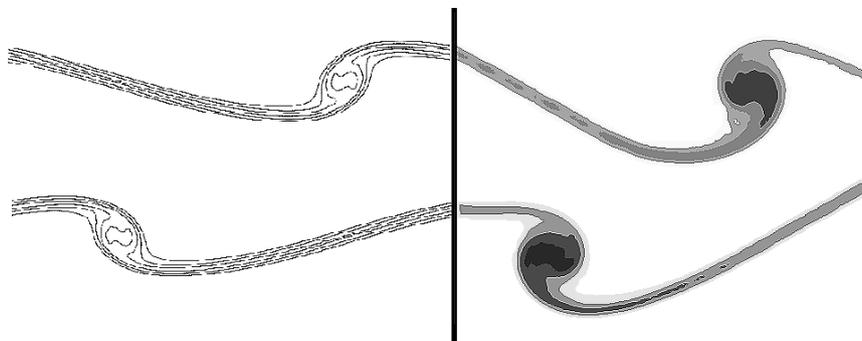


Рис.1. Сопоставление решения задачи (26). Слева – решение из [9]. Справа – текущий алгоритм. Показаны изолинии вихря с числовыми значениями от 0.002 до 0.02 с шагом 0.003.

Сопоставим решение модельной задачи возмущенного пограничного слоя, предложенной и решенной в ряде публикаций, в том числе и в [9]. В квадратной области расчета $\{x,y\} \in [0,1]$, размером 128x128 ячеек с периодическими граничными условиями по всем сторонам ставится начальная задача вида:

$$U_x = \begin{cases} U_0 \tanh[4(y-1/4)/w]; & y \leq 1/2 \\ U_0 \tanh[4(3/4-y)/w]; & y > 1/2 \end{cases} \quad (26)$$

$$U_y = U_0 \cdot \delta \cdot \sin(2\pi(x+1/4)); \rho = \rho_0 = const$$

Здесь $w=0.05$ – параметр, определяющий начальную ширину пограничного слоя, а $\delta = 0.05$ определяет начальное возмущение пограничного слоя. Число Рейнольдса $R=10\,000$, все числовые значения взяты из [9]. На Рис.1. показано сопоставление двух решений задачи (26) при 3300 шагах по времени. Решение слева взято из [9], решение справа получено текущим алгоритмом. Видно, что решение слева обладает большей схемной вязкостью. При этом вязкость фильтрации приводит к тому, что время развития неустойчивости пограничного слоя “запаздывает”, что отчетливо видно по форме двух основных вихрей.

На шаге 3300 по времени корректор энтропии по предложенной схеме (24) применяется только в двух точках, что соответствует 0,0122%. Очевидно, что данная схема вносит минимальную схемную вязкость.

Для оценки корректности предложенного алгоритма проведено решение некоторых классических тестовых задач вычислительной гидродинамики. Сопоставление результатов в задачи о течении в каверне с [11] при $R=(0.1,0.5,1.0,3.0,5.0,10.0) \cdot 10^3$ показало максимальное отличие от результатов других авторов в 1%. Выполнено моделирование течения Пуазейля с периодическими граничными условиями. Для различных чисел R получено, что при $R < 1560$ течение является полностью устойчивым с развитым решением в виде профиля параболы Пуазейля, с отличием от аналитического решения при $R=100$ в 0.54%. При увеличении R течение теряет устойчивость в районе пограничного слоя с образованием сначала крупномасштабных структур ($R < 10\,000$) а затем и всего турбулентного спектра вихрей ($R > 10\,000$). Размерность задачи 1600X400, для моделирования подсеточной турбулентности используется метод динамики больших вихрей с динамической моделью Лэре, основанной на работе [8]. Несмотря на блокировку растяжения и дробления вихрей по литеральному направлению вихревых трубок из-за двухмерности задачи, четко установлен процесс зарождения начальной неустойчивости и транспортировка систем вихрей в ядро потока.

8. Вывод.

Проведен анализ неустойчивости алгоритма решения уравнений Больцмана сеточным методом и способы его стабилизации. Предложен метод стабилизации основанный на локальной коррекции функции распределения частицы в смысле энтропии. Корректор относится к классу ограничителей классических методов вычислительной гидродинамики типа TVD. Алгоритм протестирован на ряде задач и сопоставлен с другим методом стабилизации на геометрии D2Q9. Показано, что вносимая схемная вязкость не превышает десятых долей процента. В настоящее время алгоритм распараллелен для

работы на графических адаптерах с применением технологии CUDA на сетках D3Q15 и D3Q27.

Работа поддержана Российским Фондом Фундаментальных Исследований (гранты 08-07-00074а и 09-07-00078а).

ЛИТЕРАТУРА

1. *David P. Lockard, Li-Shi Luo, Bart A. Singer.* Evaluation of the Lattice-Boltzmann ...// NASA/CR-2000-210550 ICASE Report No. 2000-40.
2. *Nourgaliev, R.R., Dinh, T.A., Dalal, D.C., Dinh, T.N., and Theofanous, T.G.* MuSiC: Multiscale Simulation Code. // UCSB-CRSS Research Report, November 20, 2000, 209p.
3. *Huang K.* Statistical Mechanics, 2nd edition. – WELLY, ISBN: 978-0-471-81518-1, 1988
4. *Alexander J. Wagner.* A Practical Introduction to the Lattice Boltzmann Method. - North Dakota State University, Fargo, 2008.
5. *Medovikov A.A., Lebedev V.I.* Variable time steps optimization...// Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling, V.20, 3,2005.
6. *Brian J. N. Wylie* Application of two-dimensional cellular automaton lattice-gas models to the simulation of hydrodynamics. - University of Edinburgh, 1990.
7. *Евстигнеев Н.М.* Интегрирование трехмерных уравнений...// Вычислительные методы и программирование, Т8, стр. 252-264, 2007г.
8. *Evstigneev N.* Integration of 3D... // Proc. Of the VII Int. conf. “Advances in Fluid Mechanics”, Oxford. pp. 194-208, 2008, 15-20 may.
9. *Ricot D., Marie S., Sagaut P., Bailly Ch.* Lattice ...// Journal of Computational Physics 228, pp 4478–4490. 2009.
10. *Ansumali S., V. Karlin I.* Phys. Rev. Lett. 95, 260605, 2005.
11. *Erturk, Corke, Gokcol.* Numerical Solutions of 2-D Steady ...// International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 48, pp. 747-774, 2005.

ON THE LATTICE BOLTZMANN METHOD STABILIZATION FOR TURBULENT FLOW REGIMES WITH EXTREMELY HIGH REYNOLDS NUMBERS

N. Evstigneev

Institute for System Analysis, RAS, Moscow

Abstract. The paper considers a lattice Boltzmann method stabilization when Reynolds number goes to infinity, i.e. infinitely small viscosity. Stream and collide algorithm is considered and every fractural step is analyzed for stability. As the result of the analysis, the local limiter of the particle probability distribution function evolution is introduced for entropy deviation. The limiter is equivalent to the classic CFD TVD limiters. A set of initial-boundary value problems is solved on D2Q9 lattice to verify the method and its stability properties. The work is supported by RFFI grants 08-07-00074a and 09-07-00078a

Key Words: Lattice Boltzmann Method, Stabilization, Computational Fluid Dynamics, Large Eddy Simulation.

УДК 510.53; 519.712.2; 338.27

**ОБНАРУЖЕНИЕ ПОЛИНОМИАЛЬНОГО АЛГОРИТМА РЕШЕНИЯ
NP ЗАДАЧИ МНОГОМЕРНОГО ПРОГНОЗИРОВАНИЯ
В РЕЖИМЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ**

А.Н. Гусев

Аннотация. В работе ставится и решается задача прогнозирования в многомерном экономическом пространстве с применением множества аналитических математических моделей, построенных по многомерным статистическим данным. Набор моделей образует базу знаний, позволяющую генерировать полный комбинаторный набор сценариев прогнозирования. Каждый сценарий реализует итеративную процедуру определения очередной устойчивой точки прогноза. Даны оценки количества сценариев в зависимости от размерности экономического пространства. Теоретически показано, что многомерное прогнозирование представляет собой NP задачу с недетерминированным алгоритмом. Экспериментально показано, что время последовательного решения задачи прогнозирования экспоненциально зависит от размерности пространства. Обнаружено, что параллельное решение задачи прогнозирования выполняется за полиномиальное время, что подтверждено экспериментально на примере прогнозирования численности населения Германии, ВВП и других измерений 6-мерного экономического пространства её статистических данных.

Ключевые слова: многомерный прогноз; статистические данные; численность населения; ВВП; экспорт; индекс потребительских цен; NP задача; полиномиальное время выполнения; сценарий, база знаний.

Введение

Целесообразность любой деятельности возникает как следствие формирования и выполнения задач управления по результатам прогнозирования анализируемых процессов. Прогноз потребности в электроэнергии до 2030 года показывает её возрастание на 50% [1], поэтому, например, фирма IBM сформулировала задачу создания «зеленых» центров обработки данных, потребляющих на 40% меньше энергии. В 20 веке фактическое потребление воды возросло в 6 раз, а в 21 веке до 2020 года согласно исследованиям ООН каждый пятый человек не будет иметь доступа к качественной питьевой воде, поэтому жизненно важными оказываются технологии оптимизации состояний водных бассейнов, управления водными потоками, расхода воды и т.д.

Прогнозирование является интеллектуальным свойством, наименее поддающимся алгоритмизации. Аналогичное человеческое свойство характеризуют как интуицию или предвосхищение, т.е. свойство предвидения будущих событий и последствий, связанных с ними, которому чрезвычайно трудно обучить даже способного человека.

Вместе с тем известны различные техники перебора возможных цепочек событий и их последствий, например, просчет вариантов при игре в шахматы на несколько ходов вперед. Класс задач перебора или поиска является на сегодняшний день самым сложным и загадочным, не случайно проблема анализа способов решения подобных задач и

решение проблемы $P =? NP$ стоит первой в перечне актуальных математических проблем современности [2].

Методология поиска и перебора легла в основу метода сценариев, реализованного для прогнозирования с помощью средств вычислительной техники. Метод сценариев завоевал популярность еще и тем, что все возможное многообразие вариантов развития полностью характеризуется тремя вариантами: наиболее пессимистическим, наиболее оптимистическим и наиболее вероятным сценариями. Рассмотрение трех указанных видов сценариев является надежной основой для принятия решений для управления любыми видами экономических объектов.

1. Теоретические основы прогнозирования

Рассмотрим четырехмерное пространство $\{t, x, y, z\}$. В работе [3] показано, как по статистическим данным для переменной x строятся математические модели $x = f(y, z, t)$, $x=x_{21}(y,t)$, $x=x_{22}(z,t)$ и $x=x_{23}(y,z)$, $x=x_1(t)$, аналогичные модели получаем для переменных y и z .

Для вычисления прогноза $x_{t+1} = f_{t+1}(y_{t+1}, z_{t+1}, t+1)$ необходимо знать функцию f_{t+1} и значения переменных y_{t+1} и z_{t+1} , но они неизвестны. В работе [4] предлагается итеративный алгоритм вычисления прогнозируемых величин по математическим моделям меньшей размерности.

Вариант сценария предусматривает на первом этапе существенность прогнозируемых параметров от времени, а на втором от времени и еще от одной переменной: для X от Y , для Y от X , а для Z также от X . Возможные варианты сценариев приведены в табл.1. Итеративный алгоритм прогнозирования для первого сценария приведен на рис.1.

Таблица 1
Возможные варианты сценариев прогнозирования переменных X, Y, Z

№	Первый этап			Второй этап		
1	$x=x_1(t)$	$y=y_1(t)$	$z=z_1(t)$	$x=x_{21}(y,t)$	$y=y_{21}(x,t)$	$z=z_{21}(x,t)$
2	$x=x_1(t)$	$y=y_1(t)$	$z=z_1(t)$	$x=x_{21}(y,t)$	$y=y_{21}(x,t)$	$z=z_{22}(y,t)$
3	$x=x_1(t)$	$y=y_1(t)$	$z=z_1(t)$	$x=x_{21}(y,t)$	$y=y_{21}(x,t)$	$z=z_{23}(x,y)$
4	$x=x_1(t)$	$y=y_1(t)$	$z=z_1(t)$	$x=x_{21}(y,t)$	$y=y_{22}(z,t)$	$z=z_{21}(x,t)$
5	$x=x_1(t)$	$y=y_1(t)$	$z=z_1(t)$	$x=x_{21}(y,t)$	$y=y_{22}(z,t)$	$z=z_{22}(y,t)$
6	$x=x_1(t)$	$y=y_1(t)$	$z=z_1(t)$	$x=x_{21}(y,t)$	$y=y_{22}(z,t)$	$z=z_{23}(x,y)$
7	$x=x_1(t)$	$y=y_1(t)$	$z=z_1(t)$	$x=x_{21}(y,t)$	$y=y_{23}(x,z)$	$z=z_{21}(x,t)$
8	$x=x_1(t)$	$y=y_1(t)$	$z=z_1(t)$	$x=x_{21}(y,t)$	$y=y_{23}(x,z)$	$z=z_{22}(y,t)$
9	$x=x_1(t)$	$y=y_1(t)$	$z=z_1(t)$	$x=x_{21}(y,t)$	$y=y_{23}(x,z)$	$z=z_{23}(x,y)$

Предлагаемый алгоритм имеет высокую устойчивость. Для получения искомой точки $\{t+1, x_{t+1}, y_{t+1}, z_{t+1}\}$ в среднем требуется 3-4 итерации.

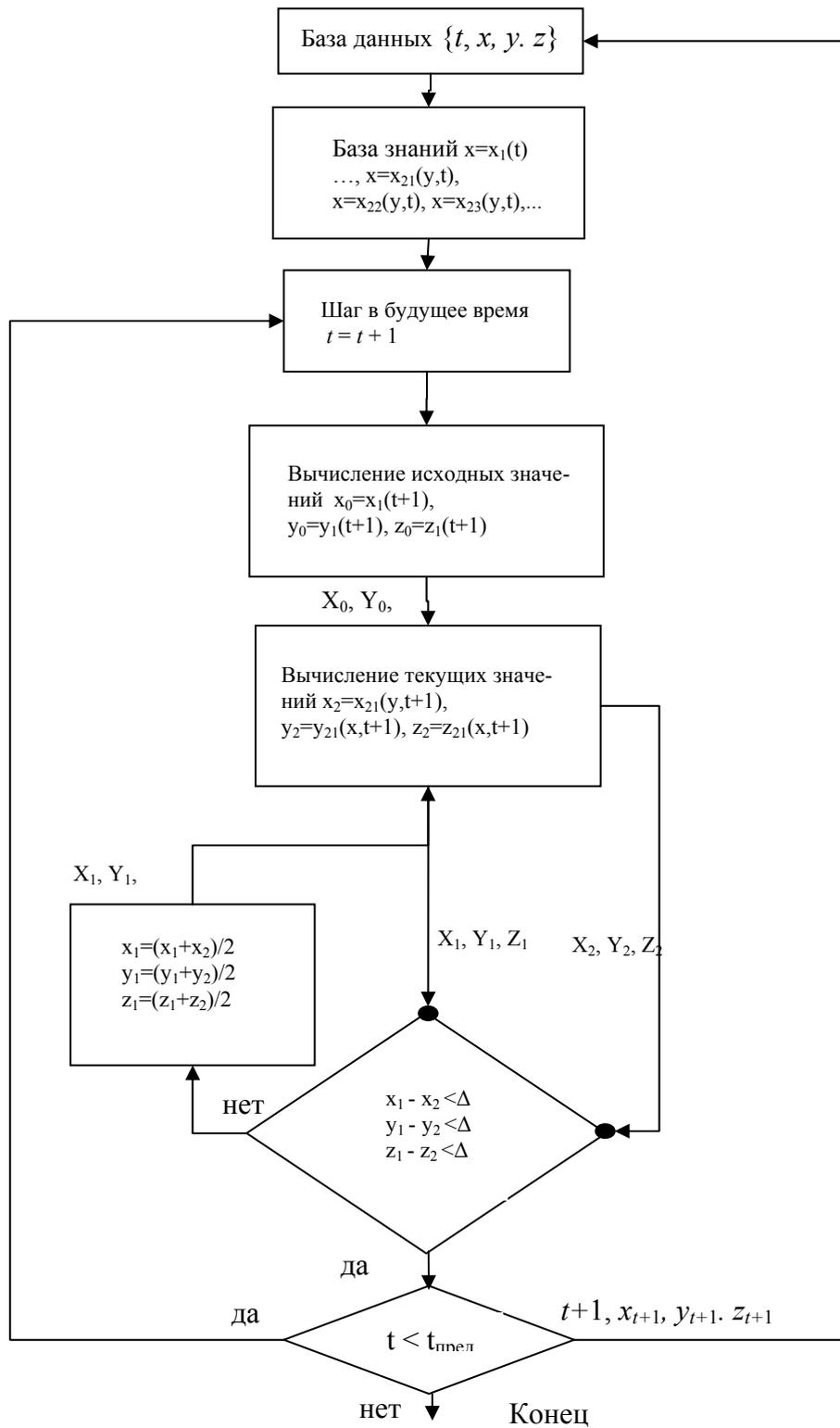


Рис. 1. Итеративный алгоритм прогнозирования

Как видно из табл. 1, в ней приведены только те варианты, в которых на втором этапе применяется функция $x=x_{21}(y,t)$. Для вычисления X возможно применение ещё двух функций $x=x_{22}(z,t)$ и $x=x_{23}(y,z)$. Общее число вариантов сценариев для четырехмерного пространства $\{t, x_1, x_2, x_3\}$ определяется комбинациями трех видов функций для каждой из трех переменных, т.е. оно равно $3^3 = 27$ вариантов.

Для определения трех основных сценариев необходимо для каждого из 27 вариантов прогноза реализовать алгоритм, приведенных на рис. 1, а затем выбрать из них наиболее пессимистический, наиболее оптимистический и наиболее вероятный. Например, при прогнозировании параметра X , который всегда желательно получить возможно большим (объем ВВП, прибыль и т.д.), наиболее оптимистическим прогнозом будет максимальное прогнозируемое значение, наиболее пессимистическим прогнозом будет минимальное значение, а наиболее вероятным будет среднее значение из полученных при прогнозировании 27 возможных значений.

Алгоритмизация сценариев будущего развития обеспечивается разработанной автором информационной технологией построения многомерных моделей исследуемых объектов [3], а сама методология прогнозирования изложена в работе [4], где приведена верхняя оценка количества сценариев. Нижняя оценка количества сценариев определяется по формуле:

$$K = (n - 1)^{(n-1)}, \quad (1)$$

где n – размерность экономического пространства, в котором анализируется экономический объект. Таким образом, мы имеем дело с NP задачей, поскольку она решается недетерминированным алгоритмом с экспоненциальным временем выполнения, которое можно оценить по формуле:

$$T = \tau_{op} * O_{cz} * K, \quad (2)$$

где τ_{op} – среднее время выполнения вычислительной операции, O_{cz} – среднее количество вычислительных операций при моделировании одного сценария, K – нижняя оценка количества сценариев.

Существенным отличием разработанной информационной технологии является создание базы знаний общих и частных математических моделей, аналитически описывающих взаимосвязи различных наборов параметров исследуемого объекта. В работе [5] были продемонстрированы результаты прогнозирования макроэкономических показателей России на длительный период с полным учетом взаимосвязей шести параметров экономического пространства России, а в данной работе рассмотрим прогноз макроэкономических показателей Германии.

2. Исходные данные

На сайте Federal Statistical Office - *Statistics Portal* [6] (вкладка Population > Population projection) представлен прогноз численности населения Германии (табл. 1).

Официальный прогноз численности населения Германии до 2060 года

Год	Пессимистический вариант		Оптимистический вариант	
	х 1000	2008=100 %	х 1000	2008=100 %
2008	82,002	100	82,002	100
2010	81,545	99.4	81,545	99.4
2020	79,914	97.5	80,437	98.1
2030	77,350	94.3	79,025	96.4
2040	73,829	90.0	76,757	93.6
2050	69,412	84.6	73,608	89.8
2060	64,651	78.8	70,120	85.5

Статистические данные взяты с сайта Статистическая база данных Европейской Экономической Комиссии ООН [7] (табл. 2). Параметры экономического пространства Германии имеют следующий смысл: t – годы с 1990 г. по 2008 г., x_1 – численность населения Германии, тыс. чел, x_2 – ВВП, Миллион \$, x_3 - индекс потребительских цен, 2005=100, x_4 – экспорт, Миллион \$, x_5 - ВВП на душу населения, \$.

Таблица 2

Статистические данные экономических показателей Германии

t	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
1990	79364	1462798	72,751	410819	18432
1991	79984	1591273	75,9	403747	19895
1992	80594	1664151	79,8	431415	20649
1993	81179	1688728	83,3	379489	20803
1994	81422	1770162	85,6	426830	21741
1995	81661	1840409	87,1	520102	22537
1996	81896	1891661	88,3	520404	23098
1997	82052	1935848	90	508305	23593
1998	82029	1989715	90,8	538260	24256
1999	82087	2063799	91,3	538900	25142
2000	82188	2130231	92,7	546214	25919
2001	82340	2211799	94,5	566121	26862
2002	82482	2275443	95,8	612391	27587
2003	82520	2358367	96,8	747658	28579
2004	82501	2467765	98,5	908448	29912
2005	82464	2586521	100	983574	31365
2006	82366	2708668	101,6	1134959	32886
2007	82263	2835283	103,9	1348429	34466
2008	82131	2927713	106,6	1495046	35647

3. Результаты прогнозирования

В данной работе прогнозирование, как и в работе [5], проводилось в трех различных пространствах: четырехмерном $\{t, x_1, x_2, x_3\}$, пятимерном $\{t, x_1, x_2, x_3, x_4\}$ и шестимерном $\{t, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\}$ пространстве.

Для каждого из трех различных пространств $\{t, x_1, x_2, x_3\}$, $\{t, x_1, x_2, x_3, x_4\}$, $\{t, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\}$ нижняя оценка числа сценариев соответственно равна 27, 256 и 3125. Оценка временных характеристик решения задачи в зависимости от размерности применяемого пространства прогнозирование оценивалась экспериментально.

Прогнозирование проведено на 52 шага вперед по одному году до 2060 года, при этом сценарии моделировались последовательно и для каждого прогнозируемого года осуществлялся выбор сценария по критерию минимальной близости прогнозируемых параметров к средним значениям, вычисленным для всего множества рассмотренных сценариев. Длительность времени последовательного выполнения задачи в зависимости от размерности экономических пространств и типа вычислительной системы приведены на рис. 2.

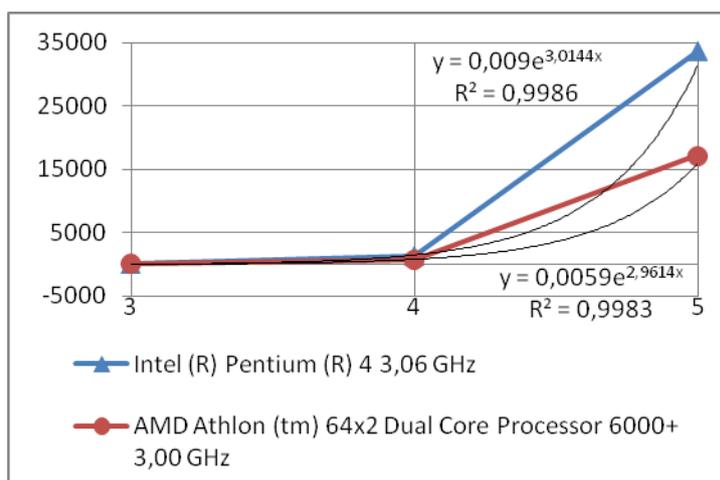


Рис. 2. Длительность последовательного решения задачи прогнозирования, мс в зависимости от размерности экономических пространств и типа вычислительной системы

Экспериментальные результаты подтверждают, что мы имеем дело с задачей NP – типа, поскольку время выполнения экспоненциально возрастает с ростом размерности экономического пространства.

Вместе с тем все моделируемые сценарии могут быть смоделированы независимо друг от друга, поэтому, если применить многопроцессорную систему с необходимым количеством процессоров (в данном случае 27, 256 или 3125), то время выполнения задачи с применением распределенных параллельных вычислений определяется средним временем моделирования одного сценария. Зависимость этого времени от размерности пространства приведена на рис. 3.

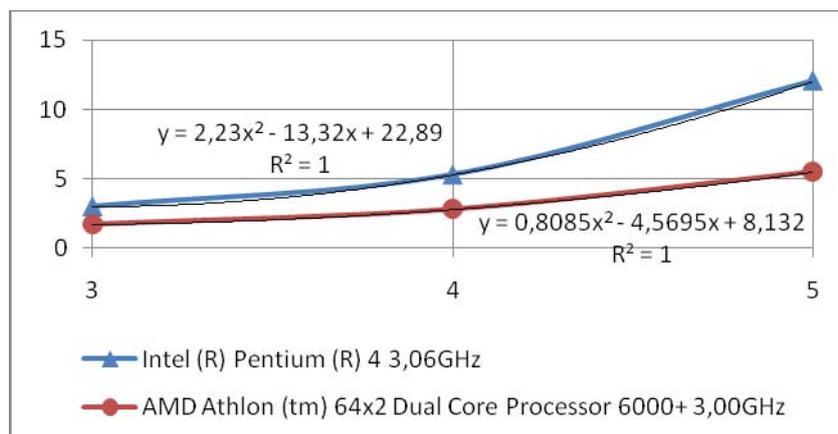


Рис. 3. Длительность параллельного решения задачи прогнозирования, мс в зависимости от размерности экономического пространства и типа вычислительной системы

Результаты прогнозирования в пространстве $\{t, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\}$ являются наиболее адекватными по сравнению с результатами прогнозирования в подпространствах $\{t, x_1, x_2, x_3\}$ и $\{t, x_1, x_2, x_3, x_4\}$. На рис. 4 и 5 приведены средние данные для численности населения и величины ВВП.

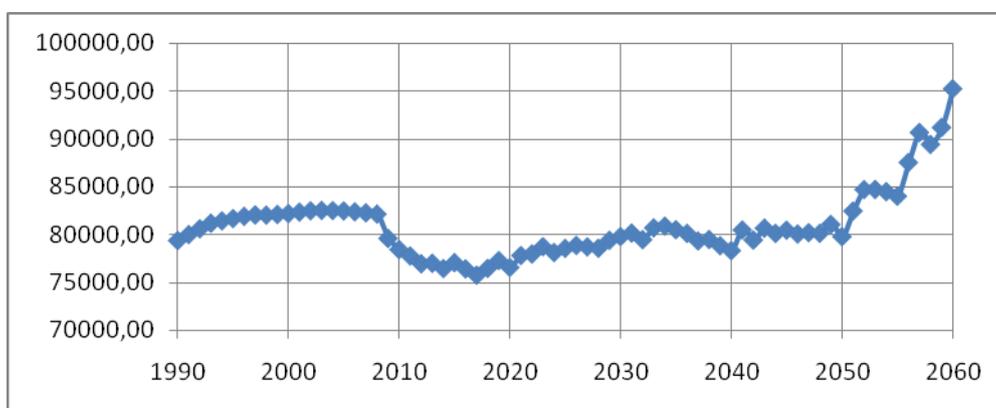


Рис. 4. Фактическая (1990 – 2008 г.г.) и средняя прогнозируемая (2009 – 2060 г.г.) численность населения Германии, тыс. чел.

Из рис. 4 видно падение численности населения в период с 2008 года по 2017 год до среднего значения 75,724 млн. человек, а затем длительный рост численности до 2060 года, для которого средняя численность составит 95,267 млн. человек.

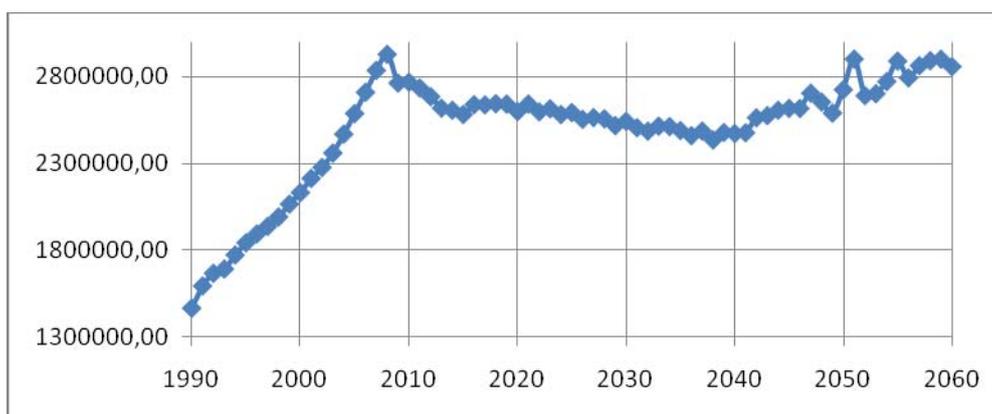


Рис. 5. Фактические (1990 – 2008 г.г.) и средние прогнозируемые (2009 – 2060 г.г.) значения ВВП Германии, млн. долл. США

Наши результаты прогнозирования численности не совпадают с официальным прогнозом из табл. 1, представленным на сайте Statistisches Bundesamt Deutschland [6]. Для более удобного сравнения с официальными данными (табл. 1) в табл. 3 также приведены верхние и нижние прогнозные оценки численности населения Германии.

Таблица 3

Наш прогноз численности населения Германии до 2060 года

Год	Пессимистический вариант		Оптимистический вариант	
	х 1000	2008=100 %	х 1000	2008=100 %
2008	82,131	100	82,131	100
2010	78,249	95,23	78,584	95,7
2020	73,321	89,23	79,749	97,1
2030	72,645	88,5	86,893	105,8
2040	68,657	83,6	87,930	107,1
2050	69,248	84,3	90,286	109,9
2060	70,940	86,4	119,593	145,6

В сравнении с данными табл. 1 наш прогноз нижней границы численности характеризуется средним квадратическим отклонением небольшой величины 2,46 % от официального прогноза. Прогноз верхней границы численности отличается от официального прогноза величиной среднего квадратического отклонения 10,93 %, что объясняется прогнозированием роста численности с 2017 года в нашем прогнозе, в то время как в официальном прогнозе имеет место постоянное снижение численности на весь прогнозируемый период.

4. Обсуждение результатов

Исследование предложенного алгоритма решения задачи многомерного прогнозирования можно провести не только от размерности пространства объекта (рис. 1, 2), которая является только одним измерением (число столбцов без учета времени) исходного массива статистических данных (табл. 2), но и от второго измерения исходного массива

(число строк), т.е. от количества экспериментальных точек, характеризующих исследуемый объект.

Методика данной работы позволила получить зависимость времени последовательного решения задачи от числа строк исходного массива. В процессе прогнозирования каждая новая точка прогноза добавляется к исходному массиву перед началом очередного цикла итеративного поиска очередной точки прогноза (рис. 1 – связь предпоследнего логического блока с первым блоком). По результатам прогнозирования в шестимерном пространстве $\{t, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\}$ получена полиномиальная зависимость времени решения задачи прогнозирования от числа строк исходного массива (рис. 6).

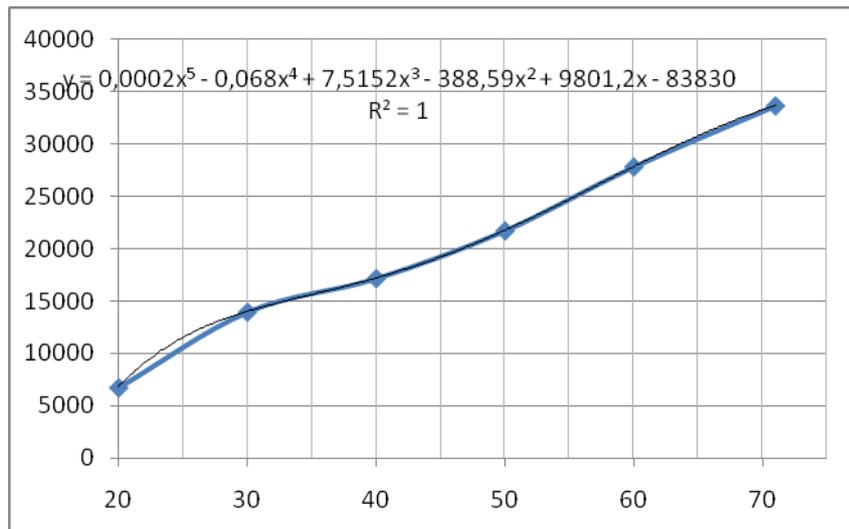


Рис. 6. Зависимость времени последовательного решения, мс от числа строк исходного массива данных, характеризующих исследуемый объект

Таким образом число строк исходного массива не является определяющим фактором для времени решения задачи в сравнении с числом столбцов, соответствующим размерности пространства объекта.

Дальнейший анализ времени решения задачи многомерного прогнозирования проведем для идеальной многопроцессорной системы, имеющей неограниченное число процессоров. В этом случае время решения задачи соответствует выражению

$$T = A * \frac{e^{kx}}{x^k}, \tag{3}$$

где $A, k - \text{const}$, $x = (n-1)$ – размерность пространства объекта без учета времени.

С применением аппроксимации времени решения задачи при условии полного распараллеливания вычислений для процессора AMD Athlon (tm) 64x2 Dual Core Processor 6000+ 3,00 GHz (рис. 2) имеем уточненное выражение вида

$$T_{\text{реш}}(x) = 0,0059 * \frac{e^{2,9614 * x}}{x^k}. \tag{4}$$

Для полученного выражения зависимость $T_{scen}(x)$ от размерности задачи x при условии полного распараллеливания представлена на рис. 7.

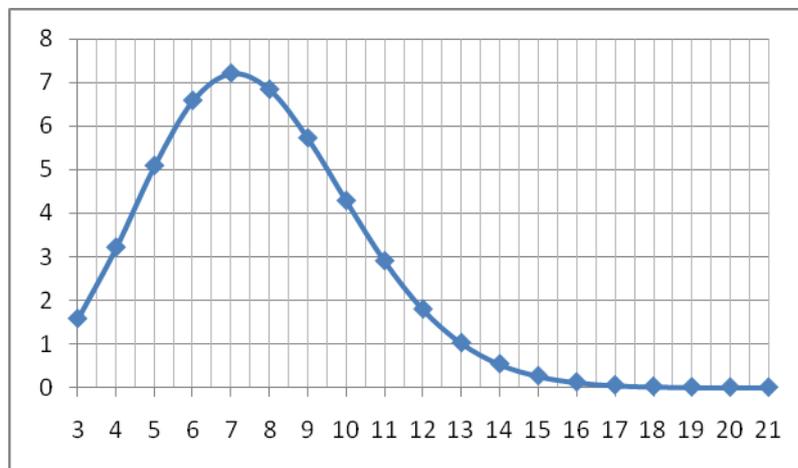


Рис. 7. Зависимость времени решения задачи $T_{scen}(x)$, мс от размерности пространства x объекта без учета времени

Представленная на рис. 7 зависимость на начальном участке является полиномиальной, затем достигает экстремума, а потом переходит в аномальную зависимость, когда с ростом размерности время решения сначала резко ($n=7-15$), затем медленно уменьшается. Это объясняется мощностью алгоритма распараллеливания, в котором количество сгенерированных сценариев нарастает с ростом размерности существенно быстрее, чем число вычислительных операций решения задачи и время их выполнения.

Рассмотрим реальный случай, когда многопроцессорная вычислительная система имеет ограниченное количество процессоров, например, возьмем суперкомпьютер Jaguar - Cray XT5-HE Opteron Six Core 2.6 GHz – лидер TOP500 на ноябрь 2009 года [8] который содержит 224162 процессоров. В случае ограничения на число процессоров на определенном этапе число сценариев превышает число процессоров и для решения задачи необходимо число N_t тактов с временем, равное выражению

$$N_t = \text{int} \left[\frac{K}{224162} \right] + 1, \quad (5)$$

где K - число сценариев и вычисляется по формуле (1).

Расчет числа сценариев K , аппроксимированного времени последовательного решения $T_{анп}$, времени выполнения T_{scen} для идеальной многопроцессорной системы, необходимого числа тактов N_t , и времени $T_{task} = T_{scen} * N_t$ для реальной системы с числом процессоров 224162 в зависимости от размерности задачи x приведен в табл. 5.

Таблица 5

Параметры параллельного алгоритма решения задачи многомерного прогнозирования в системе с числом процессоров 224162

x	K	$T_{annp} = 0,0059e^{2,8614 \cdot x}$	T_{scen}, ms	N_t	T_{task}, ms
3	27	42,58053	1,577057	1	1,577057
4	256	822,869	3,214332	1	3,214332
5	3125	15901,95	5,088624	1	5,088624
6	46656	307305,3	6,58662	1	6,58662
7	823543	5938678	7,211133	4	28,84453
8	16777216	1,15E+08	6,840527	75	513,0395
9	3,87E+08	2,22E+09	5,724618	1729	9897,865
10	1E+10	4,29E+10	4,285967	44611	191201,3
11	2,85E+11	8,28E+11	2,903013	1272793	3694934
12	8,92E+12	1,6E+13	1,795202	39775254	71404596
13	3,03E+14	3,09E+14	1,021279	1,35E+09	1,38E+09
14	1,11E+16	5,98E+15	0,537941	4,96E+10	2,67E+10
15	4,38E+17	1,16E+17	0,263802	1,95E+12	5,15E+11
16	1,84E+19	2,23E+18	0,121017	8,23E+13	9,96E+12
17	8,27E+20	4,31E+19	0,05215	3,69E+15	1,92E+14
18	3,93E+22	8,34E+20	0,021189	1,76E+17	3,72E+15
19	1,98E+24	1,61E+22	0,008143	8,83E+18	7,19E+16
20	1,05E+26	3,11E+23	0,002969	4,68E+20	1,39E+18
21	5,84E+27	6,02E+24	0,00103	2,61E+22	2,68E+19

Зависимость T_{task} реальной многопроцессорной системы от размерности пространства оказалась различной для разных диапазонов значений x (рис. 8). Из табл. 5 также видно, что число сценариев K с ростом размерности задачи x сначала меньше, а затем начинает на порядки превышать аппроксимированное последовательное время решения задачи T_{annp} соответствующей размерности, что также подтверждает ход зависимости времени T_{scen} , представленной на рис. 7.

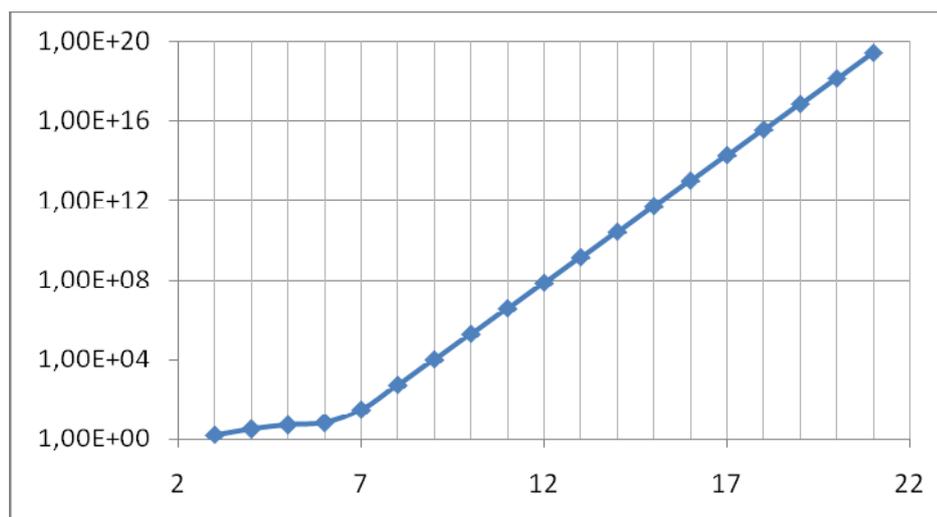


Рис. 8. Зависимость времени решения задачи многомерного прогнозирования T_{task} , мс от размерности пространства x для суперкомпьютера с числом процессоров 224162 типа AMD Athlon

Таким образом для наилучшего реального суперкомпьютера с числом процессоров 224162 только для $x=3-6$ мы получаем полиномиальное время решения задачи (рис. 9), а при $x \geq 7$ мы снова получаем экспоненциальное время решения, хотя в алгоритме всегда реализуется распараллеливание на 224162 процессора.

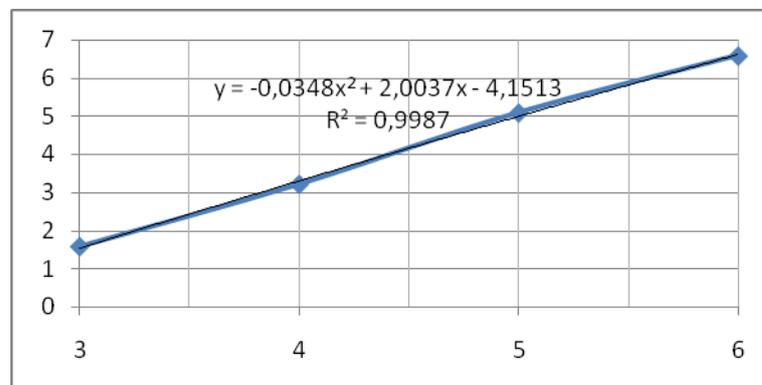


Рис. 9. Зависимость времени решения задачи многомерного прогнозирования T_{task} , мс для размерностей $x=3-6$ для суперкомпьютера с числом процессоров 224162 типа AMD Athlon

Разработанный алгоритм в данной работе применен для прогнозирования макроэкономических показателей Германии в шестимерном пространстве экономических параметров, пять из которых имеют экономический смысл: численность населения Германии, ВВП, индекс потребительских цен, экспорт и ВВП на душу населения, а шестой параметр - время.

Предложенный алгоритм позволяет решать задачи не только в экономике (на государственном, региональном и муниципальном уровнях), но также в области микроэлектроники (прогнозирование и оптимизация составов материалов или режимов технологических процессов), в области медицины (например, прогнозирование состояний больных после тяжелых операций или во время операций в режиме реального времени), в области экологии, исследования климата, а также во многих других областях.

5. Заключение

1. Теоретически и экспериментально показано, что задача многомерного прогнозирования относится к классу NP задач с экспоненциальным временем решения при последовательном вычислении.
2. Моделирование сценариев с нижней оценкой $(n-1)^{(n-1)}$ их количества в пространстве размерности n , включая время, проводится алгоритмическим перебором независимо друг от друга и определяет естественный параллелизм задачи.
3. Экспериментально и теоретически показано, что в режиме параллельных вычислений по количеству сценариев NP задача многомерного прогнозирования решается за полиномиальное время.
4. В качестве примера проведено многомерное прогнозирование численности населения Германии. Оно показало падение численности населения в период с 2008 года по 2017 год до среднего значения 75,724 млн. человек, а затем длительный рост чис-

ленности до 2060 года, когда средняя численность составит 95,267 млн. В статье приведены также результаты прогнозирования ВВП Германии на период до 2060 года.

5. 5. Методология многомерного прогнозирования позволяет синхронно получить прогнозные данные всех параметров объекта, существующего в многомерном пространстве.
- 6.

ЛИТЕРАТУРА

1. Инновационные решения для «Умной» планеты / Think!, 2009, № 1, С. 8 – 13.
2. Millennium Prize Problems / http://en.wikipedia.org/wiki/Millennium_Prize_Problems.
3. Гусев А.Н. Информационная технология создания математических моделей для исследования экономических объектов / Вестник Московского государственного областного университета. Серия «Экономика», вып. 2. М.: МГОУ. - 2007. С. 43–48.
4. Гусев А.Н. Математическая реализация сценариев прогнозирования характеристик многомерного экономического объекта / Проблемы экономики, управления народным хозяйством и экономического образования – осень 2007. Сб. статей М.: МГОУ, 2007, С. 155-160.
5. Гусев А.Н. Прогнозирование основных показателей экономики Российской Федерации / Вестник Московского государственного областного университета. Серия «Экономика», вып. 1. М.: МГОУ. - 2010. С. 7–10.
6. Statistisches Bundesamt Deutschland <http://www.destatis.de>.
7. UNECE Statistical Database <http://w3.unece.org/pxweb>.
8. TOP 500 Supercomputer Sites <http://www.top500.org>.

THE DETECTION POLINOMIAL ALGORITHM DECISION NP TASKS MDX PREDICTION IN MODE OF PARALLEL COMPUTING

A. Gusev

*Moscow State Regional University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. The task in this work is and is forecasting in MDX economic area with the use of analytical mathematical models built on multidimensional statistical data. Set of models forms a knowledge base to generate full Combinatorial set of forecasting scripts. Each script realizes iterative procedure of definition regular stable forecast point. There are the appraisals of the amount of the script depending on the dimension of economic space. In theory it's disclosed that MDX prediction is a *NP* task with the nondeterministic algorithm. In practice it's revealed that time of serial solution of the task forecasting exponentially depends on the dimensions of space. Parallel decision task of forecasting is fulfilled polynomials that is confirmed experimentally for different types of forecasting, for example, population of Germany, GDP and other settings MDX economic space of its statistics.

Key Words: the multivariate forecast; the statistical data; the population; Gross domestic product (GDP); the export; Consumer Price Index (CPI); *NP* problem; polynomial running time; scenario, Knowledge Base.

ФИЗИКА

УДК 537.6

О ВЫЧИСЛЕНИИ ПРОДОЛЬНОЙ МАГНИТНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ
ФРАКТАЛЬНЫХ ФЕРРОДИЭЛЕКТРИКОВ

С.Б. Богданова, С.О. Гладков

*Московский государственный областной университет.
105005, Москва, ул. Радио, д. 10а.*

Аннотация. Получено общее выражение для продольной компоненты тензора магнитной восприимчивости фрактального легкоосного ферромагнетика с размерностью $d_F = 3 - \varepsilon$, где $\varepsilon > 0$.

Ключевые слова: магнитная восприимчивость, фрактальный объект, дробное дифференцирование.

Фрактальная геометрия впервые довольно полно была изложена, по – видимому, в монографии [1]. Главное предназначение ее – описание различного сорта «неправильных» объектов, называемых фрактальными. Классическими иллюстрациями здесь являются хорошо известные канторова пыль, кривая Коха, ковер Серпинского и т.д.

Размерность Хаусдорфа –Безиковича, характеризующая фрактал, по определению есть критическая размерность d_F , при которой мера M_d множества изменяет свое значение с нуля на бесконечность [2]:

$$M_d = \sum \gamma(d)\delta^d = \gamma(d)N(\delta)\delta^d \rightarrow \begin{cases} 0, d > d_F \\ \infty, d < d_F \end{cases}, \delta \rightarrow 0$$

где $\gamma(d)$ - некоторый коэффициент, δ - радиус элемента покрытия, $N(\delta)$ - количество элементов покрытия множества. В случае самоподобных фракталов размерность Хаусдорфа совпадает с размерностью подобия, определяемую следующим образом [2]:

$$d_F = \frac{\ln N}{\ln \frac{1}{r}}, \text{ где } N - \text{наименьшее число элементов диаметра } r, \text{ необходимых для покрытия}$$

множества.

Указанные выше классические фракталы являются самоподобными и характеризуются разными фрактальными размерностями. Для канторовой пыли $d_F = \frac{\ln 2}{\ln 3} \approx 0,63$,

для кривой Коха $d_F = \frac{\ln 4}{\ln 3} \approx 1,26$, а для ковра Серпинского $d_F = \frac{\ln 3}{\ln 2} \approx 1,58$. При этом

топологическая размерность d_T первого множества равна нулю, а второго и третьего – единице. Множества, у которых $d_T = 2$ и $2 < d_T < 3$ образуют фрактальные поверхности, описание и способ построения которых можно найти в [2].

В настоящей работе речь пойдет о вычислении тензора магнитной восприимчивости $\chi_{ik} = \frac{\partial M_i}{\partial h_k}$ [3] фрактального ферромагнитного диэлектрика и, более того, только о продольной компоненте χ_{zz} .

Переменное магнитное поле ориентировано вдоль некоторой выделенной оси z , а потому $\vec{h}(t) = (0; 0; h_z(t))$, где линейно поляризованная напряженность РЧ поля есть $h_z(t) = h_0 e^{-i\omega t}$, h_0 – его амплитуда, ω – частота.

Для вычисления интересующей нас продольной составляющей тензора магнитной восприимчивости, воспользуемся определением (см. [4 – 6])

$$\chi_{zz} = \frac{\partial M_z}{\partial h_z} = -\frac{\mu_e}{a^3} V_\varepsilon \frac{\partial}{\partial h_z} \int f_k \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}, \quad (1)$$

где f_k – функция распределения магнонов, $f_k = f_0 + \delta f$, $f_0 = \frac{1}{e^{\frac{E_k(t,\varepsilon)}{T_0}} - 1}$ – равновесная

бозевская функция распределения магнонов, где T_0 – температура термостата, а

$f_k = \frac{1}{e^{\frac{E_k(t,\varepsilon)}{T}} - 1}$ – квазиравновесная функция распределения, a – межатомное расстоя-

ние, μ_e – элементарный магнитный момент электрона, V_ε – фрактальный объем магнетика, $E_k(t, \varepsilon)$ – энергия магнона в переменном РЧ поле, зависящая от времени, от волнового вектора магнона \vec{k} и от параметра фрактальной размерности ε . Постоянную Больцмана будем полагать равной единице.

Поскольку в переменном магнитном поле температура магнонов изменяется (происходит их разогрев), то отклонение функции распределения магнонов от равновесного значения можно представить в виде

$$\delta f = \frac{\partial f_0}{\partial T_0} \delta T, \quad (2)$$

где разность температур $\delta T = T - T_0$ предстоит вычислить.

Для вычисления δT воспользуемся кинетическим уравнением, которое с учетом интеграла столкновений сразу же представим в тау – приближении

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} = -\frac{\delta f}{\tau_k}, \quad (3)$$

где τ_k – время релаксации магнона.

Энергию магнона (для примера см. [6 – 8]) с учетом внешнего переменного поля запишем в виде:

$$E_k(t, \varepsilon) = E_k(\varepsilon) + \mu_e h_z(t), \quad (4)$$

где для фрактальной структуры энергия $E_k(\varepsilon)$ была вычислена в [9] и

$$E_k(\varepsilon) = \alpha_\varepsilon M_0^2 (k_x^{2-2\varepsilon} + k_y^{2-2\varepsilon} + k_z^{2-2\varepsilon}) + \mu_e (H_0 + \beta M_0). \quad (5)$$

Подчеркнем здесь, что обменная константа α_ε учитывает меру, обеспечивающую правильную размерность первого слагаемого, а ее связь с обменным интегралом такая:

$$\alpha_\varepsilon = \frac{J_{ex}}{M_0^2} a^{2-2\varepsilon}, \quad (6)$$

где J_{ex} – обменный интеграл, β – константа магнитной анизотропии, M_0 – спонтанная намагниченность, H_0 – постоянное и однородное внешнее магнитное поле, если оно есть.

Подстановка (4) и (2) в уравнение (3) с учетом квазиравновесной функции распределения, приводит нас к следующему соотношению

$$\frac{\partial f_0}{\partial T_0} \delta T + \frac{\partial f_0}{\partial E_k(\varepsilon)} \mu_e h_z = - \frac{\partial f_0}{\partial T_0} \frac{\delta T}{\tau_k(\varepsilon)}. \quad (7)$$

Поскольку $\frac{\partial f_0}{\partial E_k} = - \frac{T_0}{E_k(\varepsilon)} \frac{\partial f_0}{\partial T_0}$, то отсюда имеем:

$$\delta T + \frac{\delta T}{\tau_k(\varepsilon)} = \frac{\mu_e h_z}{E_k(\varepsilon)} T_0. \quad (8)$$

Для получения правильного решения уравнения (8) его следует предварительно усреднить по волновым векторам магнона. С этой целью нужно обе части этого уравнения умножить на равновесную функцию распределения f_0 и проинтегрировать по всем k . Поскольку главный вклад в интеграл, содержащий экспоненциальную функцию, дает область значений волновых векторов $E_k(\varepsilon) \sim T_0$, то с точностью до численного коэффициента уравнение (8) примет вид

$$\delta T + \frac{\delta T}{\bar{\tau}(\varepsilon)} \approx \mu_e h_z, \quad (9)$$

где $\bar{\tau}(\varepsilon)$ – среднее время релаксации магнона.

Отсюда сразу же следует искомое решение

$$\delta T = \frac{i\omega \mu_e h_z \bar{\tau}(\varepsilon)}{1 - i\omega \bar{\tau}(\varepsilon)}. \quad (10)$$

Подстановка функции распределения $f_k = f_0 + \frac{\partial f_0}{\partial T_0} \delta T$ с учетом (10) в выражение (1) приводит к следующему соотношению

$$\begin{aligned} \chi_{zz} &= -\frac{\mu_e}{a^3} V_\varepsilon \frac{\partial}{\partial h_z} \int \mathcal{J} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \\ &= -\frac{\mu_e^2 V_\varepsilon}{(2\pi a)^3} \cdot \frac{i\omega \bar{\tau}(\varepsilon)}{1 - i\omega \bar{\tau}(\varepsilon)} \frac{\partial}{\partial T_0} \int \frac{d^3 k}{e^{\frac{E_k(\varepsilon)}{T_0}} - 1}. \end{aligned} \quad (11)$$

При подстановке (5) в (11) удобно перейти к сферическим координатам: $k_x = k \sin \theta \cos \varphi, k_y = k \sin \theta \sin \varphi, k_z = k \cos \theta$. В результате мы найдем

$$\begin{aligned} \chi_{zz}(\omega) &= -\frac{\mu_e^2 V_\varepsilon}{(2\pi a^{1-\varepsilon})^3 N} \cdot \frac{i\omega \bar{\tau}(\varepsilon)}{1 - i\omega \bar{\tau}(\varepsilon)} \frac{\partial}{\partial T_0} \int \frac{d^3 k}{e^{\frac{E_k(\varepsilon)}{T_0}} - 1} = \\ &= \frac{3\mu_e^2 V_\varepsilon}{2(2\pi a^{1-\varepsilon})^3 N} \cdot \frac{i\omega \bar{\tau}(\varepsilon)}{1 - i\omega \bar{\tau}(\varepsilon)} \frac{\Gamma(\frac{3\varepsilon}{2\varepsilon - 2})}{(1 - \varepsilon)^2} e^{-\frac{\mu_e(H_0 + \beta M_0)}{T_0}} \times \\ &\times \left(\frac{T_0}{J_{ex}}\right)^{\frac{3}{2(1-\varepsilon)}} \zeta\left(\frac{3}{2(1-\varepsilon)}\right) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi g^{\frac{3}{2(\varepsilon-1)}}(\varphi, \theta) \sin \theta d\theta, \end{aligned} \quad (12)$$

где функция $g(\varphi, \theta) = \sin^{2-2\varepsilon} \theta \cos^{2-2\varepsilon} \varphi + \sin^{2-2\varepsilon} \theta \sin^{2-2\varepsilon} \varphi + \cos^{2-2\varepsilon} \theta$.

Формула (12) отвечает на вопрос о зависимости продольной магнитной восприимчивости фрактального ферромагнитного диэлектрика от температуры и частоты приложенного РЧ поля.

Заметим, что поскольку $V_\varepsilon = Na^{3(1-\varepsilon)}$, то результат (12) удобно представить в еще более компактном виде:

$$\chi_{zz} = \frac{3\mu_e^2}{2(2\pi)^3} \cdot \frac{i\omega \bar{\tau}(\varepsilon)}{1 - i\omega \bar{\tau}(\varepsilon)} \frac{\Gamma(\frac{3\varepsilon}{2\varepsilon - 2})}{(1 - \varepsilon)^2} e^{-\frac{\mu_e(H_0 + \beta M_0)}{T_0}} \left(\frac{T_0}{J_{ex}}\right)^{\frac{3}{2(1-\varepsilon)}} \zeta\left(\frac{3}{2(1-\varepsilon)}\right) D_\varepsilon. \quad (13)$$

где двойной интеграл по угловым переменным

$$D_\varepsilon = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi g^{\frac{3}{2(\varepsilon-1)}}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta. \quad (14)$$

Из нее, в частности видно, что при $\varepsilon = 0$ у нас получается стандартное выражение для продольной восприимчивости (см. [6]). Если же теперь взять второй (уже предсказательный) предельный случай $\varepsilon = \frac{1}{2}$, то мы получим, что $\chi_{zz} = 0$, поскольку интеграл от функции g обращается в нуль. Во всяком случае видно, что вблизи значения $\varepsilon = \frac{1}{2} - \nu$, где ν – малая величина, температурная зависимость восприимчивости близ-

ка к T_0^3 , что соответствовало бы линейному спектру магнонов. В действительности линейный спектр магнонов существует только в антиферромагнетиках (при особых предположениях), но не в ферромагнетиках.

Именно поэтому данный результат чрезвычайно важен, поскольку демонстрирует возможность вырождения (при некоторых значениях ε) магنونного квадратичного спектра в почти линейный, если речь идет о фрактальном ферродиелектрике.

Резюмируя результаты, выделим главное.

1. Предложена теория продольной магнитной восприимчивости фрактального ферромагнетика и вычислена ее частотная и температурная зависимости;

2. Предсказано, что в подобного типа магнитных структурах температурная зависимость будет обладать значительно более плавным поведением в отличие от обычного ферромагнетика.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Мандельброт Б.* Фрактальная геометрия природы. Ижевск, РХД, 2002г. 665с.
2. *Федер Е.* Фракталы. М.:Мир, 1991. 254с.
3. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* «Электродинамика сплошных сред». Т.8. М.: Наука, 1986. 620 с.
4. *Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., С.В. Пелетминский.* Спиновые волны. М.: Наука, 1967. 368 с.
5. *Лифшиц И.М., Азбель М.Я., Каганов М.И.* Электронная теория металлов. М.: Наука. 1971. 415 с.
6. *Gladkov S.O.* The Kinetics of Nuclear Ordered Systems. Physics Reports. 1989. V. 182. N4, 5. PP. 211 – 365.
7. *Гладков С.О.* Физика композитов: термодинамические и диссипативные свойства. М.: Наука. 1999. 330 с.
8. *Гладков С.О.* К теории одномерной и квазиодномерной теплопроводности. //ЖТФ. 1997. т.67. Вып.7. С.8 – 12.
9. *Богданова С.Б., Гладков С.О.* К вопросу о спектре магнонов в структурах не целой размерности. Труды 10-й конференции «Актуальные проблемы современной науки». Часть 4-6, с.56-60. Самара 2009.

ON THE CALCULATION OF LONGITUDINAL MAGNETIC SUSCEPTIBILITY IN FRACTAL FERROMAGNET DIELECTRIC

S. Bogdanova, S. Gladkov

*Moscow State Regional University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. It was founded the general expression for longitudinal component of magnetic susceptibility tensor of fractal easy-axis ferromagnetic with dimension $d_F = 3 - \varepsilon$, where $\varepsilon > 0$.

Key Words: magnetic susceptibility, fractional object, fractional differentiation.

УДК 577.32(21)

ТРИТИЕВАЯ ПЛАНИГРАФИЯ: МЕТОДИКА, ОБЛАСТИ ПРИМЕНЕНИЯ, НЕКОТОРЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Е. Н. Богачева, А. А. Долгов, А. В. Шишков

*Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук,
119991, Москва, Косыгина, 4,*

*(по материалам доклада на заседании семинара на физико-математическом факультете
Московского государственного областного университета № 16 от 21.01.10)*

Аннотация. Излагается методика тритиевой планиграфии (ТП). Проведено сравнение с другими методами. Разработан комплексный подход к исследованию пространственной структуры белков, основанный на совместном использовании экспериментального метода ТП и пакета программ для интерпретации опытных данных и предсказания структуры белков. Представлены некоторые результаты применения этого подхода к решению широкого круга задач, таких как построение трехмерной структуры биомолекулы и сравнение ее с кристаллической (если она известна), определение ориентации молекулы и степени ее погруженности, когда она находится на границе раздела фаз, и других.

Работа поддержана РФФИ (09-03-00469).

Ключевые слова: тритиевая планиграфия, белок, биомолекула.

Введение

Специфика биологических закономерностей проявляется уже на низших структурных уровнях, поэтому модели в биофизике должны быть основаны на непосредственных, полученных в прямых экспериментах, сведениях о реальных молекулярных свойствах биологического объекта. В подавляющем большинстве биологически важных процессов доминируют молекулы белков, и без знания их пространственной структуры понимание механизма процесса на молекулярном уровне невозможно. Отсюда вытекает принципиальная роль в биофизике таких методов, с помощью которых можно получать прямую информацию о механизмах молекулярных процессов в биосистемах.

В результате более чем полувековой работы с помощью рентгеноструктурного анализа (РСА), а затем двумерного и многомерного ядерного магнитного резонанса (ЯМР) удалось расшифровать с атомным разрешением пространственные структуры около 64000 белков. Между тем выделено и охарактеризовано более миллиона разных белков. Подавляющее большинство расшифрованных структур принадлежат в основном водорастворимым белкам, а число мембранных белков с установленной структурой – около двух сотен.

То, что пространственные структуры известны для незначительной доли биомолекул, объясняется известными ограничениями методов, часть которых принципиальна. Так, РСА дает информацию о структуре с высоким разрешением (как правило, в виде совокупности координат центров атомов - т.н. pdb-файлы из банка пространственных

структур Protein Data Bank), но требует, чтобы вещество находилось в кристаллической фазе, а также имеет ограничения по молекулярному весу. Более того, трудности получения кристаллических структур биомолекул с высокой степенью упорядоченности заставляют думать о принципиальной невозможности применения метода РСА для структурных исследований промежуточных форм, образующихся в ходе того или иного процесса. При этом всегда существуют определенные сомнения относительно тождественности структуры объекта в кристалле и в естественных условиях функционирования (в растворе). ЯМР применим для растворов, но высокой концентрации. У метода тритиевой планиграфии нет ограничений по молекулярной массе объекта, он позволяет исследовать как твердые вещества, так и растворы, причем при низких концентрациях.

Еще один процесс - адсорбция белков на поверхности раздела фаз вода-воздух играет важную роль как в процессах функционирования биологических систем, так и во многих областях науки и технологии. Белковые компоненты широко используются для стабилизации дисперсных систем, и знание структуры адсорбционных слоев имеет принципиальное значение для создания различного рода микрооптических и микроэлектронных устройств и высокочувствительных биосенсоров [14].

Существующие методы исследования адсорбции (поверхностное натяжение, протеолиз, энзиматический гидролиз в сочетании с измерением гидродинамических характеристик, оптические методы: эллипсометрия, светорассеяние, ИК-спектроскопия) дают информацию о некотором приповерхностном слое. Недавно появился метод отражения нейтронов, который может предоставить информацию о толщине адсорбционного слоя и сделать выводы о структуре слоя. Результаты применения метода ТП к изучению структуры адсорбционных слоев белка лизоцима на границе фаз представлены ниже.

Методика

Метод тритиевой планиграфии относится к методам изучения пространственной структуры биологических макромолекул, что позволяет исследовать важнейшую связь в биологии между структурой объекта и его функцией и необходимо для понимания на молекулярном уровне физических и химических процессов, протекающих в живых организмах. Суть метода состоит в том, что поверхность исследуемого вещества облучается потоком горячих атомов трития со специально подобранными характеристиками. Все биополимеры содержат углеводородные фрагменты. В белках – это C α -атомы и боковые группы остатков аминокислот. Модификация сводится к замене обычного водорода в этих группах на его изотоп – тритий, что, очевидно, не меняет структуру объекта. Процесс замещения включает в качестве начальной стадии реакцию отрыва водорода с энергетическим барьером 0.3 эв. Именно поэтому нужны горячие атомы трития и высокая температура нити-диссоциатора. С этим же связана и необходимость использования низких давлений молекулярного трития, обеспечивающих свободный пробег атома от нити до поверхности мишени. Важно отметить, что мишень термостатируется при температуре жидкого азота, что позволяет исследовать структуру объекта на разных временных стадиях процесса, прерывая его ход быстрым охлаждением. Радиоактивность трития обеспечивает высокую чувствительность метода. Малые размеры атома трития (0,09 нм), используемого в качестве нанозонда, позволяют обнаружить участки, локализованные в поверхностном слое макромолекулы. Затем проводится разделение на фрагменты (вплоть до отдельных аминокислотных остатков) молекул опыт-

ного образца и определяется распределение радиоактивности в них, что и является целью опыта. Дальнейшая обработка этих данных дает информацию о стерической доступности компонентов системы (макромолекулы в составе комплекса, аминокислотных остатков и даже отдельных атомных групп в макромолекуле [1-6]).

Основными этапами опыта являются:

1. Тритиевая бомбардировка образца
2. Удаление лабильного трития.
3. Выделение биомолекул образца с дополнительной очисткой.
4. Разделение на субъединицы (пептиды, аминокислотные остатки).
5. Анализ субъединиц совместно с определением радиоактивности.
6. Определение распределения радиоактивности по субъединицам.

Техника введения метки очень проста. Процесс осуществляется в стеклянном сосуде-реакторе, в центре которого находится металлическая нить, нагреваемая электрическим током до температуры 2000К. Исследуемое вещество-мишень наносится в виде пленки на внутреннюю стенку реактора. В реактор подается молекулярный тритий, который, попадая на нить, диссоциирует на атомы, которые бомбардируют мишень и замещают в ней водород на тритий. Дальнейший анализ внутримолекулярного распределения метки проводится с помощью обычных для белковой химии методов. Несмотря на поверхностный характер процесса (третий проникает на глубину порядка 0.3-0.5 нм), в силу рельефности поверхности удается получить информацию примерно о 2/3 входящих в состав аминокислотных остатков. Очевидно, что именно поверхностный слой в первую очередь отвечает за взаимодействие, и поэтому так важна информация о нем. В результате удастся определить, какими именно остатками образована поверхность макромолекулы, и получить профиль доступности полипептидной цепи, образующей молекулу.

Уже только эта информация весьма ценна, т.к. позволяет сделать целый ряд выводов о структуре: определить коэффициент шероховатости поверхности, степень свернутости полипептидной цепи. Наконец, зная поверхность, можно предсказать участки, играющие важную роль в различных взаимодействиях макромолекул как друг с другом, так и с низкомолекулярными веществами.

Полученные профили радиоактивности используются для решения широкого круга задач, таких как построение трехмерной структуры биомолекулы и сравнение ее с кристаллической (если она известна), определение ориентации молекулы и степени ее погруженности, когда она находится на границе раздела фаз, и других.

Моделирование

Объектом моделирования является ансамбль биомолекул, подвергаемый тритиевой бомбардировке. Исходной информацией обычно являются:

1. Первичная структура биомолекулы (упорядоченная последовательность аминокислотных остатков, ее составляющих).
2. Пространственная структура (pdb-файл с набором координат атомов, аппроксимированных Ван-дер-Ваальсовыми сферами).
3. Информация об объекте, полученная другими методами.
4. Опытные данные ТП.

При этом используются специально разработанный имитационный алгоритм тритиевой бомбардировки, модельные представления и стандартные программы, для

предсказания трехмерной структуры по заданной первичной, модифицированные для учета данных ТП, в частности, программа Rozetta. Проводится сопоставление данных различных опытов или опытных данных с проведенными расчетами. При этом возможно неслучайное расхождение между опытными и расчетными данными, обусловленное структурной перестройкой биомолекулы в эксперименте по сравнению со сравниваемой структурой, взятой из pdb-файла. Делается теоретическое предсказание элементов вторичной структуры белка. Рассчитывается профиль доступности в изолированных элементах вторичной структуры путем компьютерной имитации эксперимента. Проводится определение контактных областей между элементами вторичной структуры сравнением экспериментального и компьютерного профилей доступности, после чего осуществляется сборка элементов вторичной структуры в компактную модель с учетом локализованных областей контакта.

Одним из основных допущений при моделировании эксперимента, справедливым при весьма общих предположениях, является пропорциональность измеряемой на опыте активности и потока J , который для элементарной ориентированной площадки dS определяется как

$$J = \int j(n)(dS \cdot n)d\Omega .$$

Здесь $j(n)$ - распределение потока в направлении, заданном единичным вектором n , $d\Omega$ – элемент телесного угла, соответствующий заданному направлению; интегрирование ведется по всем доступным направлениям.

Другое упрощение при моделировании, обусловленное вычислительными трудностями, - замена ансамбля молекул одной, которая имеет случайную или определенную ориентацию. Заметим, что экспериментальное определение $j(n)$ в тритиевой планиграфии сопряжено со значительными трудностями, и вместо этого делается какое-либо допущение о его характере, которое используется при дальнейшей интерпретации полученных экспериментальных данных. Обычно допускается, что поток состоит из вертикально падающих на поверхность частиц с постоянной скоростью [9]. Вопрос о влиянии характеристик потока до сих пор оставался открытым. Ниже на основе анализа представленных экспериментальных данных и предложенной модели будет показано, что характер распределения может играть существенную роль.

Структура адсорбционных слоев белка лизоцима на границе фаз изучалась методом ТП. Результатом эксперимента является величина удельной радиоактивности белка A , получаемая путем отнесения радиоактивности к количеству белкового материала в пробе. Так как величина пробега горячих атомов трития в конденсированной фазе менее 1 нм, то включение метки происходит в основном при первом столкновении атома с поверхностью мишени, и величина радиоактивности белка I должна быть пропорциональна площади поверхности раствора, занятой белковым компонентом, т.е. $I = k n_s S_p$, где n_s - число молекул белка на единицу площади поверхности, а S_p - экспонированная для атомов трития поверхность белковой глобулы. Удельная радиоактивность в этом случае определяется простым выражением: $A = I / (n_s + n_v) = k n_s S_p / (n_s + n_v)$ где n_v - концентрация белка в растворе. В нашем случае $n_s + n_v$ есть величина постоянная и равна исходной концентрации белка в растворе: $n_s + n_v = c_v$. Можно было ожидать, что изменение величины удельной радиоактивности во времени будет отражать увеличение концентрации белка в поверхностном слое, т.е. будет иметь вид, типичный для изотермы адсорбции.

В опыте, в интервале времен адсорбции 1 - 10 мин удельная радиоактивность растет, но при больших временах начинает снижаться и в интервале 60 - 120 мин остается величиной постоянной, составляя $\sim 20\%$ от значения в точке максимума. Снижение удельной активности может трактоваться как уменьшение поверхностной концентрации белка вследствие частичного разворачивания белковых глобул. Это, однако, противоречит данным нейтронного отражения [15] и нашим собственным результатам. В самом деле, разворачивание белковой глобулы означает увеличение величины S_p при одновременном уменьшении концентрации n_s . В этом случае включение метки в образец I должно после возрастания на начальном этапе оставаться величиной постоянной. Между тем временная зависимость I имеет тот же вид что и зависимость от времени A, что свидетельствует о сохранении глобулярной структуры. Остается предположить, что наблюдаемая в эксперименте зависимость A от времени отражает изменения в структурной организации адсорбционного слоя, в первую очередь изменения ориентации макромолекул относительно границы раздела фаз и степени «погруженности» глобул в водную фазу. Опыт показывает, что в интервале времен адсорбции 30 - 60 мин удельная радиоактивность белка, а следовательно и площадь поверхности белкового компонента снижается в $\sim 3 - 5$ раз. Как указано выше, удельная радиоактивность A пропорциональна концентрации белка в поверхностном слое и площади глобулы, экспонированной для атомов трития - $A = kn_s S$. Это можно представить в дифференциальной форме:

$$dA/A = dn_s/n_s + dS/S.$$

Так как величина S является функцией ориентации и степени погруженности глобулы, то может существовать точка, в которой относительное изменение n_s компенсируется изменением величины S и $dA/dt = 0$. Наблюдаемое в эксперименте уменьшение удельной активности при временах более 10 мин свидетельствует о доминирующей роли уменьшения S на поздних стадиях. Из опытных данных можно оценить степень изменения S:

$$\mu = S_\infty / (S_0 + S_\infty) \approx 0.09.$$

Сравнение расчетных удельных потоков (поток атомов трития на единицу доступной поверхности) при различных ориентациях лизоцима при условии, что над высота выступающей над поверхностью части постоянна, показывает, что это отношение меняется в пределах от 0.4 до 0.8, т.е. одним только изменением ориентации невозможно объяснить столь значительное (на порядок) уменьшение S. Следовательно, необходимо учитывать еще и погружение молекулы. Оценки, выполненные на основании численных расчетов и допущения, что центр молекулы, аппроксимируемой эллипсоидом с осями 3, 3 и 4.5 нм, первоначально располагается на поверхности, и длинная ось горизонтальна, показывают, что высота выступающей части в зависимости от ориентации должна меняться в пределах от 0.6 до 0.9 нм, чтобы обеспечить $\mu = 0.09$, что не противоречит оценкам Лу и соавт. [15] по данным нейтронного рассеяния.

Анализ внутримолекулярного распределения трития в молекуле лизоцима на уровне аминокислотных остатков различного типа позволил оценить преимущественную ориентацию белка в адсорбционном слое в процессе адсорбции. Для оценки ориентации

молекулы лизоцима в адсорбционном слое использован разработанный нами алгоритм расчета доступной анизотропному потоку атомов трития поверхности макромолекулы в условиях существования границы раздела фаз [16]. Макромолекула представляется в виде набора ван-дер-ваальсовых сфер. Атомы, способные вступать в реакцию с атомарным тритием, разбиваются на элементарные площадки, для которых оценивается поток трития, зависящий от экранировки площадки другими атомами белка и ее расположение относительно границы раздела фаз.

Молекула лизоцима подвергалась обстрелу атомами трития с 200 различных направлений, при этом варьировалась ее степень погружения в водную фазу. Высокая корреляция между теоретическими расчетами и экспериментальным распределением метки по аминокислотным остаткам свидетельствует о высокой вероятности существования такой ориентации молекулы в слое. Сопоставление удельной радиоактивности пролина и фенилаланина, находящихся на противоположных концах молекулы, позволило оценить изменение ориентации длинной оси молекул лизоцима от хаотической в начале до практически перпендикулярной границе раздела фаз (60 мин и более).

Таким образом, метод ТП может использоваться для определения структуры адсорбционных слоев на молекулярном уровне. С помощью данных ТП можно делать суждения о характере потока, что показано ниже на примере исследования вируса гриппа, относящегося к оболочечным вирусам, представляющим особый обширный класс, к которому относится большинство патогенных вирусов животных и человека. Их состав включает в себя липидную мембрану, поверхностные и внутренние белки, нуклеиновую кислоту. Вирион вируса гриппа имеет близкую к сферической форму с характерным размером порядка 100 нм и содержит на поверхности липидной мембраны гликолизированные белки гемагглютинин HA и нейраминидазу NA. Заметим, что экспериментальное определение $j(n)$ в тритиевой планиграфии сопряжено со значительными трудностями, и вместо этого делается какое-либо допущение о его характере, которое используется при дальнейшей интерпретации полученных экспериментальных данных. Обычно допускается, что поток состоит из вертикально падающих на поверхность частиц с постоянной скоростью [9]. Вопрос о влиянии характеристик потока до сих пор оставался открытым. На основе анализа представленных экспериментальных данных и предложенной модели покажем, что характер распределения может играть существенную роль [17].

В качестве объекта исследования использовали вирусы гриппа двух штаммов: X31 и A/PR/8/34. Белок выделен из вирионов вируса гриппа A/Puerto Rico/8/34 (PR8, подтип H1N1) как описано в работе [4]. Введение метки и очистка от лабильного трития подробно описаны в работе [5]. Удельную радиоактивность препаратов рассчитывали после гидролиза до аминокислот, смесь аминокислот анализировали на анализаторе аминокислот Hitachi-L8800 (Japan), соединенном на выходе с проточным сцинтилляционным счетчиком Packard Radiomatic 150TR (USA). Методика анализа подробно описана в работах [7,8,12]. Шипы гемагглютинина «сбрасывали» ферментом бромелаином по стандартной методике [4,5]. Моделирование взаимодействия потока атомов трития с поверхностью вирионов проводили по разработанному ранее имитационному алгоритму [11,16].

Проводилось сравнение включения метки в белки M1 и NP при бомбардировке нативных вирусных частиц и вирионов, с поверхности которых были удалены «шипы» гликобелков HA и NA (субвирусные частицы – СВЧ). Для вертикально падающего по-

тока это увеличение равно увеличению доступной площади вследствие удаления в $1/(1-0.4) = 1.67$ раза при доле площади, экранируемой гликобелками, равной 0.4 [10]. Такой подход изложен в работе [9]. Однако в опыте увеличение оказалось гораздо выше, причем различным для белков M1 и NP: для штамма X31 активность M1 увеличивалась в $\alpha = 2.43 \pm 0.13$ раза, для штамма PR8 – M1 - в 5.48 ± 1.22 раза, а NP – в 2.63 ± 0.64 раза.

Оценка степени возрастания потока после удаления шипов для системы цилиндров в узлах решетки, аппроксимирующих шипы HA по данным из банка PDB, дает значение $\alpha = 2.5 - 2.7$ в зависимости от способа расположения центров шипов (в вершинах квадратов или ромбов с углом 60°), что близко к экспериментальным величинам за исключением опыта со штаммом PR8 для M1 с $\alpha = 5.48$. Стандартное допущение о вертикально падающем однородном потоке неудовлетворительно согласуется с опытными данными. Подчеркнем, что при анализе допускалось отсутствие структурных перестроек в субвирусных частицах, хотя одной из причин аномально высокого возрастания активности может быть структурная перестройка мембраны.

Довольно часто на практике возникает необходимость количественного определения площади поверхности, занимаемой тем или иным компонентом (например, молекулы в адсорбционном слое или как в данном случае шипов гемагглютинина на поверхности вириона). Из рассмотренного ясно, что прямое сопоставление величин чистой поверхности и поверхности с компонентом может привести к существенным ошибкам, если не учитывать геометрические характеристики потока падающих частиц.

Выводы

1. Метод ТП позволяет получить информацию о стерической доступности субъединиц исследуемых молекул как в конденсированном состоянии, так и в растворе при низких концентрациях без ограничений по молекулярной массе.
2. Разработан комплексный подход к исследованию пространственной структуры белков, основанный на совместном использовании экспериментального метода ТП и пакета программ для интерпретации опытных данных и предсказания структуры белков.
3. Показана принципиальная возможность получения информации о характеристиках потока по результатам его взаимодействия с различными поверхностями. Установлено, что для более надежной оценки необходимо учитывать распределение потока по направлениям. Наиболее адекватной гипотезой для интерпретации представленных опытных данных представляется изотропное распределение потока по всем верхним по отношению к рассматриваемой элементарной площадке направлениям.
4. Метод ТП может использоваться для определения структуры адсорбционных слоев на молекулярном уровне, ориентации молекулу на границе раздела фаз и степени ее погруженности.
5. С помощью данных ТП можно делать суждения о характере потока, что показано на примере исследования вируса гриппа.

Работа поддержана РФФИ (09-03-00469).

ЛИТЕРАТУРА

1. Баратова Л.А., Богачева Е.Н., Гольданский В.И., Колб В.А., Спиринов А.С., Шишков А.В. Третьяковская планиграфия биологических макромолекул. М., Наука, 1999. 175с.

2. *Shishkov A.V., Bogacheva E.N.* 2007. Tritium planigraphy of biological macromolecules. In: *Methods in Protein Structure and Stability Analysis: Conformational Stability, Size, Shape and Surface of Protein Molecules*. Eds. V. N. Uversky and E. A. Permyakov. N.-Y.: Nova Science Publishers.
3. *Богачева Е.Н., Долгов А.А., Чуличков А.Л., Шишков А.В.* Применение тритиевой планиграфии в фундаментальных исследованиях в области биофизики // сб. докладов XII Международной научной конференции «Физико-химические процессы при селекции атомов и молекул и в лазерных, плазменных и нанотехнологиях», 31 марта – 4 апреля 2008 г., г. Звенигород (Ершово), с. 368.
4. *Alexander V. Shishkov, Elena N. Bogacheva, Alexey A. Dolgov, Alexey L. Chulichkov, Denis G. Knyazev, Natalia V. Fedorova, Alexander L. Ksenofontov, Larisa V. Kordyukova, Elena V. Lukashina and Lyudmila A. Baratova.* The *in situ* Structural Characterization of the Influenza A Virus Matrix M1 Protein within a Virion // *Protein. Pept. Lett.*, 2009, Oct 10.
5. *Kordyukova, L.V., Serebryakova, M.V., Polyakov, V.Y., Ovchinnikova, T.V., Smirnova, Yu.A., Fedorova, N.V., Baratova, L.A.* [Influenza A Virus M1 Protein Structure Probed by In Situ Limited Proteolysis with Bromelain](#). // *Protein Pept. Lett.* 2008, **15**, 922–930.
6. *Bogacheva E.N., Goldanskii V.I., Shishkov A.V., Galkin A.V., Baratova L.A.* Tritium planigraphy: from the accessible surface to the spatial structure of a protein. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 1998, **95** (6), 2790–2794.
7. *Лукашина Е.В., Бадун Г.А., Ксенофонтов А.Л., Баратова Л.А., Добров Е.Н., Федосеев В.М.* Использование проточного счетчика в сочетании с аминокислотным анализатором для измерения низких радиоактивностей меченных тритием аминокислот // *Радиохимия*. 2002, **44**, 78-82.;
8. *Fedorova, N.V., Ksenofontov, A.L., Viryasov, M.B., Baratova, L.A., Timofeeva, T.A. and Zhirnov, O.P.* Covalent chromatography of influenza virus membrane M1 protein on activated thiopropyl Sepharose-6B // *J. Chromatogr. B: Biomed. Sci. Appl.* 1998, **706**, 83–89.
9. *Ксенофонтов А. Л., Бадун Г. А., Федорова Н. В., Кордюкова Л. В.* Количественное определение площади гликобелков на поверхности оболочечных вирусов // *Молекулярная биология*, 2008, т. 42, № 6, с. 1093–1096
10. *Compans R.W., Klenk H.D., Caligiuri L.A., Choppin P.W.* 1970. Influenza virus proteins. I. Analysis of polypeptides of the virion and identification of spike glycoproteins. // *Virology*, **42**, 880–889.
11. *Богачева Е. Н., Богачев А. Н., Дмитриев И. Б., Долгов А. А., Чуличков А. Л., Шишков А.В., Баратова Л. А.* Построение моделей пространственной структуры белков по данным тритиевой планиграфии. // *Биофизика*. 2009. **54**.
12. *Shishkov A.V., Goldanskii V.I., Baratova L.A., Federova N.V., Ksenofontov A. L., Zhirnov O.P., Galkin A.V.* The *in situ* spatial arrangement of the influenza A virus matrix protein M1 assessed by tritium bombardment. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 1999, **96**, 7827–7830.
13. *Чуличков А.Л., Богачева Е.Н., Долгов А.А., Шишков А.В., Баратова Л.А.* Атомарный тритий как нанозонд для исследования структуры адсорбционных слоев и доступной поверхности // Сб. трудов научно-практической конференции с международным участием. Нанотехнологии и наноматериалы для биологии и медицины. Новосибирск. 11– 12 октября 2007, с.143-150.

14. Nyquist R.M., Ebelhardt A.S., Silks L.A., Li Z., Swanson B.I. // Langmuir. 2000. V. 16. P. 1793.
15. Lu J.R., Su T.J., Thomas R.K., Penfold, Webster J. // J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1998. V. 94. 3279.
16. Bogacheva E.N., Chulichkov A.L., Dolgov A.A., Shishkov A.V., Vedeniapina E.V. // Computer simulation in tritium planigraphy. 5th European Conference on Computational Biology, January 21-24, 2007, Eilat (Israel), P79.
17. Долгов А. А., Богачева Е. Н., Чуличков А. Л., Шишков А. В. Взаимодействие потока атомов трития с поверхностью наноразмерных частиц вируса гриппа А // Перспективные материалы, 2010, в печати.

TRINIUM PLANIGRAFY: A TECHNIQUE, AREA OF APPLICATION, SOME RESULTS

E. Bogacheva, A. Dolgov, A. Shishkov

*Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук,
119991, Москва, Косыгина, 4,*

*Institute of Chemical Physics them. N.N. Semenov of the Russian academy of sciences,
4, Kosygin st., Moscow, 119991*

Abstract. Stated the method of tritium planigraphy (TP). A comparison with other methods. A comprehensive approach to the study of the spatial structure of proteins, based on the joint use of the experimental method and the TP software package for the interpretation of experimental data and prediction of protein structure. Some results of this approach to a wide range of tasks such as building three-dimensional structure of biomolecules and its comparison with the crystal (if known), the definition of the orientation of the molecule and its degree of immersion, when it is at the interface, and others.

Key Words: tritium planigraphy, fiber, biomolecule.

УДК 534.2:535.36

УЛЬТРАЗВУКОВЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ЭМУЛЬСИЯХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

Г.И. Максимочкин,^{*} С.В. Пасечник,^{} С. Краль^{***}**

^{*} *Московский государственный университет приборостроения и информатики,*

^{**} *Московский государственный университет приборостроения и информатики,*

^{***} *Университет Марибор, Словения*

Аннотация: Исследованы скорость распространения и коэффициент поглощения ультразвука на частоте 2,7 МГц в эмульсиях жидкого кристалла (ЖК) Н96 в воде с размерами капель в диапазоне 200...5000 нм (образец I) и 200...1500 нм (образец II). Показана возможность изучения на основе анализа акустических параметров

ЖК эмульсий характеристик фазового перехода нематик – изотропная жидкость и критической динамики ЖК в каплях микронных и субмикронных размеров.

Ключевые слова: жидкокристаллические эмульсии, капли жидких кристаллов, ультразвуковые исследования, фазовые переходы.

I. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы опубликовано значительное число работ, посвященных исследованиям ограниченных жидкокристаллических систем [1]. Было показано, что пространственное ограничение жидких кристаллов (ЖК) сопровождается изменением в них характеристик фазовых переходов [2-5]. При условии $R \approx \xi$, где R - величина, характеризующая линейные размеры ограничений, ξ - длина корреляции параметра порядка, наблюдается изменение характера фазовых переходов [6-8]. Кроме того, в условиях пространственных ограничений существенно изменяются релаксационные характеристики жидких кристаллов при различных воздействиях. Однако, лишь ограниченное число экспериментальных методов пригодно для исследования динамических свойств ограниченных жидкокристаллических систем. Известно, что акустический метод оказался весьма полезным для исследования критической динамики ЖК при фазовых переходах, в объемных образцах [9]. При изучении ограниченных ЖК систем акустический метод до последнего времени не использовался. Была, насколько нам известно, единственная попытка [10] использования акустического метода для изучения релаксационных свойств ограниченных ЖК систем: суспензий твердых частиц (аэросилов) в жидкостях. Однако в этой работе не затрагивались проблемы, связанные с фазовыми переходами и критическим поведением ЖК в условиях пространственных ограничений.

Мы представляем результаты акустических исследований дисперсных систем на основе жидких кристаллов и изотропных жидкостей: жидкокристаллических эмульсий, представляющих собой новый, мало изученный класс, ограниченных жидкокристаллических систем, удобных для изучения фазовых переходов и критической динамики в условиях пространственных ограничений [11, 12].

Как будет показано ниже, ультразвуковой метод применим для изучения критической динамики ЖК в жидкокристаллических эмульсиях (ЖКЭ) с микронными и субмикронными размерами капель дисперсной фазы. Для обеспечения стабильности ЖКЭ, без использования поверхностно активных веществ (ПАВ), что важно для экспериментов с фазовыми переходами, следует выбирать ЖК и жидкости с близкими плотностями. Желательно также, чтобы и акустические импедансы компонентов эмульсии были близкими по значениям, для уменьшения нерелаксационного вклада в поглощение ультразвука, пропорционального разности плотностей компонентов в дисперсной системе, установленного ранее в [13]. Последний механизм может быть важен для ранее изученной в [10] дисперсной системы твердых частиц в жидком кристалле. В качестве дисперсионной фазы в ЖКЭ выгодно использовать жидкости с малым коэффициентом поглощения ультразвука, такие, как вода. Это обеспечивает возможность измерения малых изменений поглощения ультразвука в эмульсиях, вызванных каплями жидкого кристалла при малых концентрациях дисперсной ЖК фазы, порядка 0,02 ... 0,2 %. Обеспечивается также возможность акустического исследования ЖКЭ при температурах в непосредственной близости от точек фазовых переходов, что не доступно в случае исследования объемных образцов ЖК, из-за сильного возрастания поглощения ультра-

тразвука. При исследованиях ЖКЭ следует учитывать растворимость жидкости в жидком кристалле, которая также приводит к изменениям характеристик фазовых переходов в ЖК [14].

II. ТЕОРИЯ

А. Сдвиг T_{IN} .

Для оценки температурного поведения жидкого кристалла вблизи фазового перехода в эмульсиях при сильных пространственных ограничениях можно использовать феноменологическое приближение Ландау-де Жена [15]. Рассмотрим одноосное упорядочение, выраженное в терминах параметра порядка S и поля нематического директора \vec{h} . Свободная энергия F жидкого кристалла в пределах капли может быть представлена как: $F = \int f_v d^3r + \int f_i d^2r$, где первый интеграл взят по объему капли, а второй – по ограничивающей ее поверхности. В F мы принимаем во внимание лишь наиболее существенные вклады в плотность свободной энергии:

$$f_v \approx a(T - T_*)S^2 - bS^3 + cS^4 + LS^2|\nabla\vec{n}|^2 \text{ и } f_i \approx -WS(\vec{n}\vec{e})^2. \quad (1)$$

Здесь a, b, c – материальные константы, T_* – температура переохлаждения нематической фазы, L – базовая константа упругости, W – сила сцепления, \vec{e} – вектор, описывающий ориентацию легкой оси ЖК на границе раздела с изотропной жидкостью. В дальнейшем заменим S в капле его средним значением $\langle S \rangle$. Мы также предположим, что типичные деформации поля директора распределены по радиусу, т.е. $|\nabla\vec{n}|^2 \approx 1/R^2$. Получим выражение для безразмерной свободной энергии системы $G = F/F_0$, где $F_0 = a_0(T_{IN} - T_*)S_0^2$, $S_0 = S(T_{IN})$ как функции безразмерного параметра порядка q , эффективной приведенной температуры r и эффективного поверхностного потенциала σ :

$$G = F/F_0 = rq^2 - 2q^3 + q^4 - \sigma q. \quad (2)$$

Здесь $q = \langle S \rangle / S_0$, $r = (T - T_*) / (T_{IN} - T_*) + \xi_n^2 / R^2$ и $\sigma = \xi_n^2 / (Rd_e)$. Величины $\xi_n \approx \sqrt{L/a_0}$ и $d_e \approx LS_0/W$ представляют, соответственно: корреляционную длину нематического параметра порядка и поверхностную экстраполяционную длину, - определяемые при температуре T_{IN} объемного образца. Поведение эффективного Гамильтониана (2) детально исследовано в работе [16]. Для значений $\sigma < 0,5$ переход $I - N$ остается скачкообразным и имеет место при температуре:

$$T_{IN}(R) \approx T_{IN} + (T_{IN} - T_*) \left(-\frac{\xi_n^2}{R^2} + \frac{\xi_n^2}{Rd_e} \right). \quad (3)$$

В последнем выражении, вклад упругих искажений, пропорциональный величине $1/R^2$, приводит к уменьшению температуры фазового перехода, в то время как поверхностный вклад, пропорциональный $1/(Rd_e)$, поддерживает нематическую упорядочен-

ность. Переход $I-N$ становится непрерывным при значениях $\sigma \geq \sigma_c \equiv 0,5$, где $\sigma \propto 1/R$. Таким образом, для значений $R \gg \xi_n$ следует ожидать квазиобъемного упорядочения. Если величина R сравнима с ξ_n и $\sigma < 0,5$, ограничение может влиять на температуру перехода. В очень маленьких каплях, для которых $\sigma > 0,5$, ограничения нарушают скачкообразность I-N перехода.

В. Поглощение ультразвука.

Температурная зависимость релаксационного (критического) вклада в поглощение ультразвука для объемных образцов ЖК в низкочастотном пределе ($\omega\tau < 1$) может быть представлена [9] в виде:

$$\Delta\alpha / f^2 \sim A(T)\tau \sim (\Delta\alpha / f^2)_0 \Delta T^{-\beta}, \quad (4)$$

где $A(T) \sim 1/\Delta T^\gamma$, $\tau \sim 1/\Delta T^\eta$, $\beta = \gamma + \eta$, $\Delta T(T > T_{IN}) = T - T_*$, $\Delta T(T < T_{IN}) = T_{**} - T$, τ - время релаксации параметра порядка, γ, η - критические показатели, T_{**} - температура перегрева нематической фазы. Коэффициент поглощения ультразвука в ЖК эмульсии может быть представлен в виде:

$$\Delta\alpha / f^2 \sim \frac{\int R^3 P(R) \frac{(\Delta\alpha / f^2)_0}{\Delta T(R)^\beta} dR}{\int R^3 P(R) dR}, \quad (5)$$

где $P(R)$ - функция распределения капель по радиусам. Полученное выражение устанавливает связь между локальными температурными зависимостями коэффициента поглощения ультразвука в однородной жидкокристаллической среде $(\alpha / f^2)_0$ и интегральными температурными зависимостями данного параметра в неоднородной среде (жидкокристаллической эмульсии) в области фазового перехода нематический жидкий кристалл – изотропная жидкость с учетом распределения капель ЖК по размерам.

III. ЭКСПЕРИМЕНТ

А. Приготовление образцов ЖКЭ

В данной работе образцы ЖК эмульсий были приготовлены из ЖК Н96 ($T_{IN} = 345,3$ К, Харьков, Украина) и дистиллированной воды путем ультразвукового перемешивания (использовался аппарат УРСК-22Н, Россия, частота 45 кГц) в течение 10 мин, последующего нагревания при температуре около 90 градусов в стеклянной колбе в течение часа и повторного ультразвукового перемешивания - 5 мин. Н96 – представляет собой смесь, содержащую *n-n*-бутил-*n*-гексилокси-азоксибензол ($T_{IN} = 353,4$ К), *n-n*-бутил-*n*-метокси-азоксибензол ($T_{IN} = 338,5$ К), *n*-бутил-*n*-(*n*-этоксифеноксикарбонил)-фенилкарбонат ($T_{IN} = 354$ К) и *n*-бутил-*n*-(*n*-гексилоксифеноксикарбонил)-фенилкарбонат. Смесь Н96 имеет широкий температурный диапазон нематической фазы (более 60 град), что обеспечивает возможность исследования предпереходных явлений; химически стабильна при контакте с водой. Образцы эмульсий кроме капель ЖК могли содержать газовые пузырьки различных размеров. Газовая дисперсная фаза удалялась из образцов центрифугированием. Исходный

объемный состав эмульсии: Н96 - 0,2%, Н₂О - 0,98%. Ультразвуковое перемешивание компонентов приводит к формированию капель ЖК микронных размеров. При нагревании эмульсии небольшая часть ЖК растворялась в воде до состояния насыщенного раствора. При охлаждении эмульсии создавалось пересыщенное состояние указанного раствора и из него выделялись капли ЖК субмикронных размеров. Необходимым условием получения ЖК эмульсии по данной технологии является ненулевая, но ограниченная растворимость ЖК и изотропной жидкости. Дисперсная и дисперсионная фазы в ЖКЭ (при постоянной температуре) фактически представляют собой насыщенные растворы исходных компонентов (ЖК и жидкости). В данной работе под термином «капля ЖК» в эмульсии будем подразумевать капли насыщенного раствора «жидкость/жидкий кристалл» с преобладающим содержанием ЖК. Концентрация воды в каплях ЖК в эмульсиях различных размеров в состоянии насыщения одинакова и определяется температурой. Изменение температуры могло приводить к изменению растворимости компонентов и, как следствие, к изменению размеров «капель ЖК» и их состава. В данной работе были приготовлены образцы ЖКЭ с различным дисперсным составом: образец **I** с максимальным размером капель порядка 5 мкм и образец **II** – с каплями ЖК преимущественно субмикронных размеров.

В. Структура ЖКЭ.

Проведена оценка дисперсного состава образцов путем фотометрического анализа изображений капель (рис. 1 а, б), полученных на поляризационном микроскопе МС-400А (Micros, Австрия). Использовалась компьютерная обработка изображений. Распознавались изображения капель при заданном уровне дискриминации яркости. Определялись радиусы и объемы капель. Строились гистограммы распределения величин V_i/V_s и $(\sum V_i)/V_s$ по радиусам капель R_i где V_i - объем фракции капель заданного диапазона размеров, V_s - объем эмульсии (рис. 2 а, б),. По этим данным, наибольший объем дисперсной фазы сосредоточен: в образце **I** - в каплях с диаметром $R_m \approx 2,3$ мкм и в образце **II** - в каплях с диаметром $R_m \approx 400$ нм; объемная концентрация дисперсной фазы равна примерно 0,2 и 0,02 % для образцов **I** и **II** соответственно.

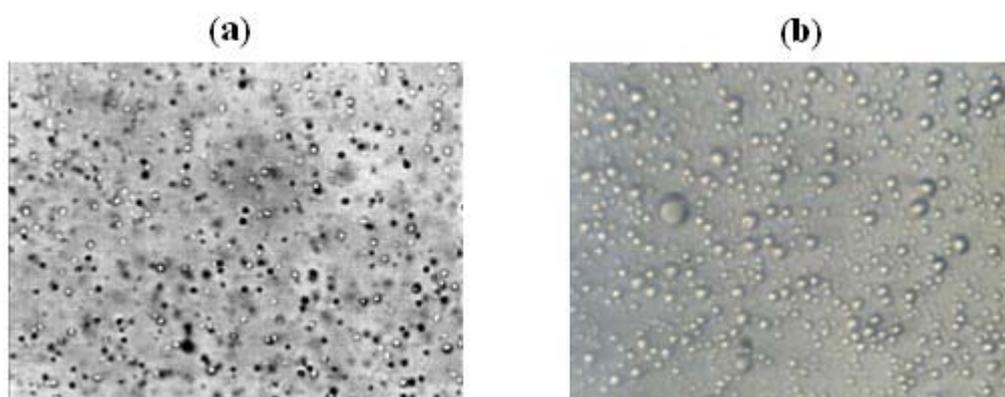


Рис. 1. Изображение капель дисперсной фазы в эмульсиях Н96/вода в образцах: **I** - (а) и **II** – (б). Поляриды параллельны; увеличение $\times 400$.

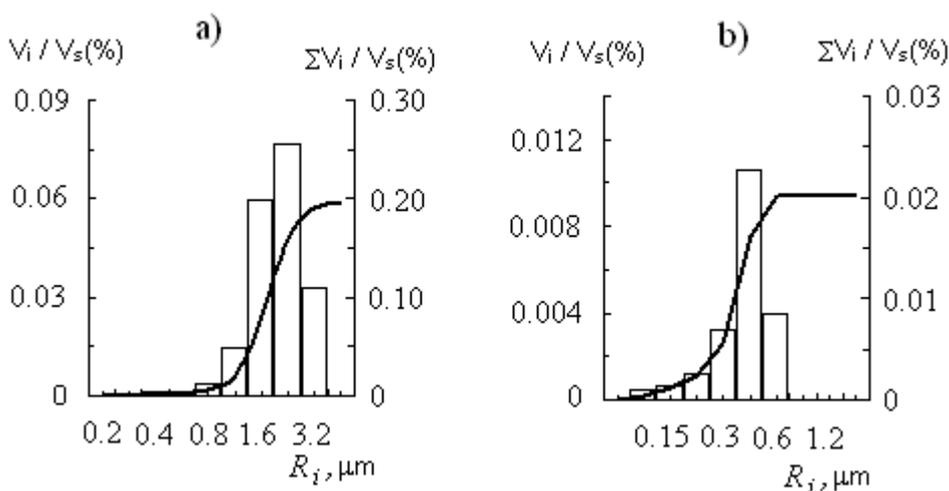


Рис. 2. Распределения объема дисперсной фазы по размерам капель для образцов ЖКЭ Н96/вода: I – (a) и II – (b).

Результаты микрофотометрических исследований ЖКЭ могут содержать существенные погрешности, связанные с дифракционными искажениями и субъективным фактором при обработке размытых изображений капель. Особенно это касается образца II с каплями преимущественно субмикронных размеров. Мы провели, дополнительно, исследования дисперсного состава образца II методом динамического рассеяния света [17] на спектрометре Photocor Complex (Photocor Instruments, Inc.) с программным обеспечением DynaLC (Alango, Ltd, US). Полученное этим методом массовое распределение дисперсной фазы M_i / M_i^{\max} по радиусам капель R_i для образца II показанное на (рис. 3) подтвердило представление о том, что образец II содержит капли преимущественно субмикронных размеров. Уточненные характеристики распределения для образца II: средневзвешенное значение радиуса капель $R_m = 341$ нм, пиковое значение радиуса $R_p = 278$ нм.

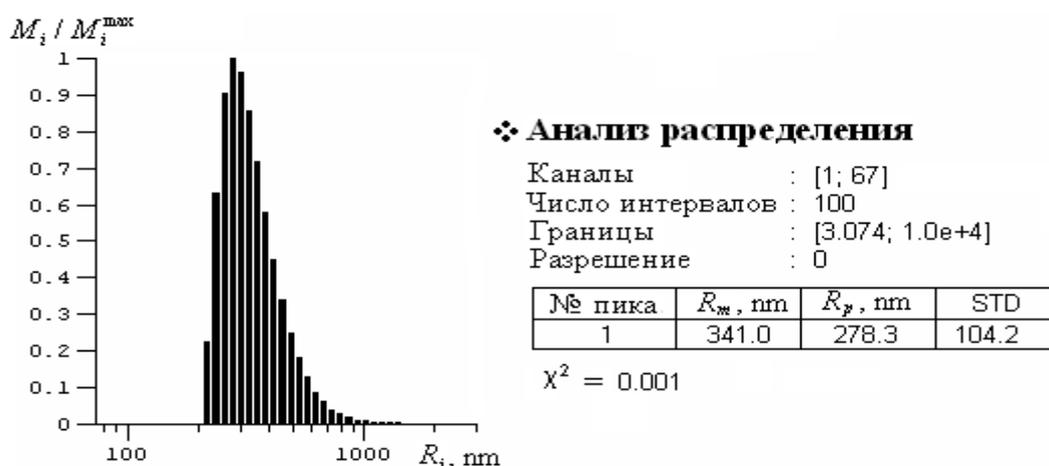


Рис. 3. Распределение массы дисперсной фазы в ЖКЭ (M_i / M_i^{\max}) по R_i в образце II, определенное методом динамического рассеяния света. R_m и R_p - соответственно, средневзвешенное и пиковое значение радиуса в распределении.

С. Ультразвуковые измерения.

Проведены измерения скорости распространения (c) и коэффициента поглощения (α) ультразвука в образцах **I** и **II** на частоте 2,7 МГц при температурах в диапазоне 293...363 К. Измерения проводились в камере с постоянной акустической базой $L=100$ мм методом перекрывающихся (длительных) импульсов [18-20]. В исследуемый образец излучались когерентные импульсы с длительностью $\tau_e \gg L/c$ с частотным заполнением f . Измерялись характеристики сигнала на выходе камеры в состоянии резонанса (рис.4 а) и амплитудно-частотные характеристики системы образец-камера (рис.4 б).

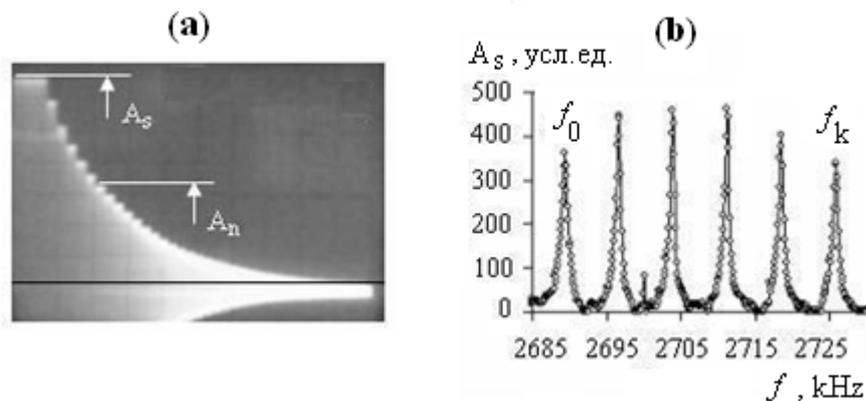


Рис. 4. Измеряемые характеристики акустического сигнала (а) и вид амплитудно-частотной зависимости системы образец-камера в методе перекрывающихся импульсов.

Абсолютные значения акустических параметров вычисляли по формулам: $\tilde{n} = 2L(f_k - f_o)/k$, $A_n = A_s \exp(-\alpha_s 2Ln)$, $\alpha = \alpha_s - \alpha_k$, где α_k – параметр, учитывающий собственные потери камеры (определялся градуировкой по воде). Погрешность абсолютных измерений α и c составляет порядка 5 и 0,05 % соответственно. Этим методом может осуществляться качественная оценка малых относительных изменений акустических параметров по формулам: $c/c_o = F/F_o(1 + b(T - T_o))$ и $\alpha(T)/\alpha_o(T_o) \approx A_{so}(T_o)/A_s(T_o)$. В этом случае, при возможных систематических погрешностях, достигается на порядок большая чувствительность к малым изменениям скорости и поглощения ультразвука [21].

Д. Оптические измерения.

Для проверки результатов акустических исследований характеристик фазовых переходов в ЖКЭ независимым методом были проведены измерения деполаризованной составляющей оптического пропускания образцов **I** и **II** в плоской оптической ячейке толщиной 2 мм. Экспериментальная установка выполнена на базе спектрального комплекса КСВУ-23М (ЛОМО, Россия). Температура в ячейке поддерживалась с точностью 0,02 К.

IV. РЕЗУЛЬТАТЫ

А. Акустические параметры

На рис. 5 и рис. 6 представлены, полученные авторами, типичные результаты по температурным зависимостям коэффициента поглощения ультразвука (параметра

α / f^2) и скорости распространения ультразвука (c) для образцов эмульсий **I**: Н96 0,2 % - вода 99,8 %; $R_i \in (0,2 \dots 5)$ мкм; $R_m = 2,3$ мкм и **II**: Н96 0,02 % - вода 99,98 %; $R_i \in (0,2 \dots 1,4)$ мкм; $R_m = 0,34$ мкм.

Микродисперсные ЖКЭ.

Зависимость $\alpha / f^2(T)$ для образца **I** имеет асимметричный вид (рис. 5, а); ветвь кривой поглощения при $T > T_{NI}$ идет более круто, чем при $T < T_{NI}$, что характерно и для объемных образцов ЖК (рис.5.с). Указанная асимметрия объясняется существованием двух механизмов поглощения ультразвука в жидких кристаллах. Первого, связанного с критическими флуктуациями параметра порядка, в изотропной и в нематической фазах. И второго, связанного с взаимодействием волны с параметром порядка S , только в нематической фазе [22]. В каплях микронных размеров в ЖК эмульсиях, по-видимому, сохраняются оба указанных механизма. Это открывает возможность исследования динамики жидких кристаллов при фазовых переходах в каплях эмульсий различных размеров акустическим методом. В качестве оценки температуры фазового перехода $T_{IN}(R_m)$ в каплях с радиусами $R \approx R_m$ в эмульсиях примем температуру, соответствующую максимуму в зависимости $\alpha / f^2(T)$ в эмульсии. По акустическим данным для образца **I** получено меньшее значение $T_{IN}(R_m)$ в каплях эмульсии по сравнению с температурой фазового переход $T_{IN} = 345,3$ К в объемном образце Н96: $\Delta T_{IN}(R_m) = T_{IN} - T_{IN}(R_m) = 2,8$ К (Таблица 1). Величину полученного сдвига $\Delta T_{IN}(R_m)$ трудно объяснить поверхностными ограничениями, так как в образце **I** условие $R_m \approx \xi$ выполняется для капель, составляющих лишь незначительную по объему фракцию дисперсной фазы. Обнаруженный сдвиг может быть связан с присутствием растворенной воды в каплях ЖК эмульсии, так как известно влияние немезогенных растворителей на температуру фазовых переходов в жидких кристаллах [14]. Кроме того, при определенных условиях, например при циклических нагреваниях и охлаждениях микроэмульсий типа ЖК/Ж в каплях дисперсной фазы возможно образование обратных эмульсий типа Ж/ЖК с каплями субмикронных размеров. Для такой сложной дисперсной системы условие $R_m \approx \xi$ выполняется (для капель обратной эмульсии) и могут проявляться эффекты, связанные пространственными ограничениями.

Субмикродисперсные ЖКЭ.

Для (образца **II**) с каплями преимущественно субмикронных размеров получен более симметричный вид температурной зависимости коэффициента поглощения (рис. 5, б) по сравнению с образцом **I**. Это, возможно, указывает на постепенное разрушение механизма поглощения ультразвука в ЖК эмульсиях, связанного с взаимодействием волны с параметром порядка S . Известно, что с уменьшением размера капель ЖК искаженная (двухполярная) нематическая упорядоченность в них разрушается и формируется радиальная упорядоченность, что эквивалентно, в какой-то мере, переходу в изотропное состояние. В целом, для образца **II** выполняется условие $R_m \approx \xi$ и $\sigma < 0.5$. Смещение $\Delta T_{IN}(R_m)$ для образца **II**, найденное из обработки акустических данных (Таблица 1) примерно на 1,8 К больше чем для образца **I** с микродисперсной ЖК фазой.

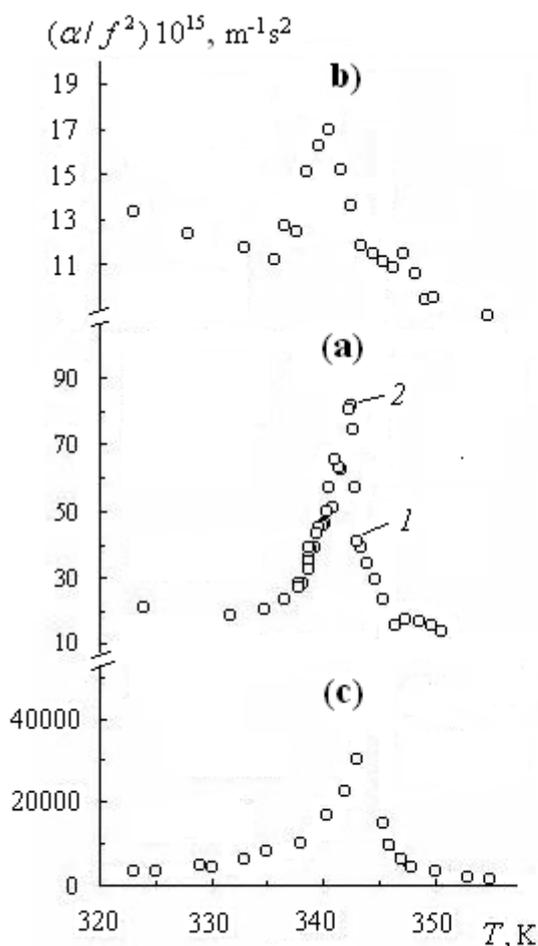


Рис. 5

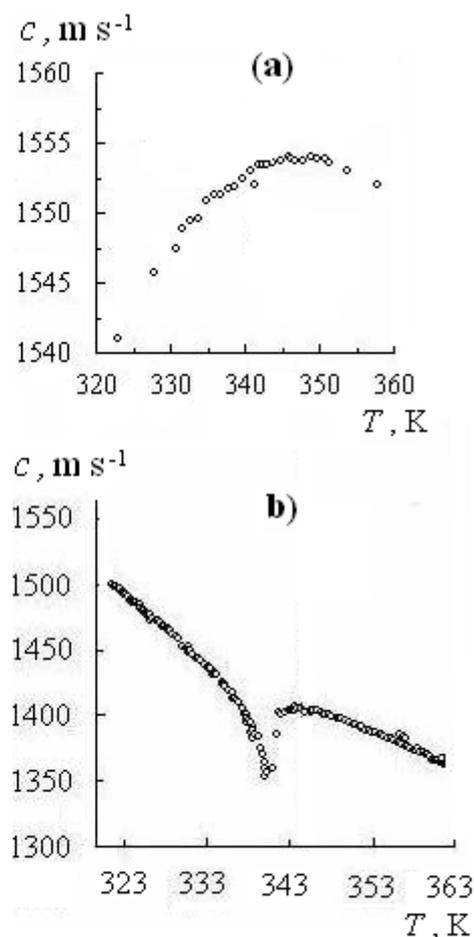


Рис. 6

Рис. 5. Акустический параметр α / f^2 на частоте 2,7 МГц в образцах эмульсии Н96/вода:

I – (а) и **II** – (б), а также в объемном образце Н96 [23] (с).

Рис. 6. Скорость ультразвука в образцах ЖК эмульсий: **I**, Н96 0,2 % - вода 0,98 % –(а) и ЖК440 3 % - ПМС5 97 % - (б).

В образце 1 наблюдалось лишь незначительное уменьшение скорости ультразвука на величину $\approx 0,2\%$ при температурах вблизи T_{IN} (рис. 6 а). Для получения приемлемой чувствительности к фазовым переходам в эмульсиях по измерениям скорости необходимо использовать образцы эмульсий с концентрацией ЖК порядка 3%. Это было установлено при исследованиях эмульсии ЖК440 3 % - ПМС5 97 %, рис.6, б.

В. Оптическое пропускание

Полученные акустические результаты по сдвигам $\Delta T_{IN}(R_m)$ в образцах **I** и **II** были проверены независимым оптическим методом, путем измерения деполаризованной составляющей оптического пропускания $I/I_0(T)$ (рис. 7) при скрещенных под углом 90 градусов поляроидах. В качестве оценки величины $T_{IN}(R_m)$ была принята температура, соответствующая перегибу зависимости $I/I_0(T)$. Данные $\Delta T_{IN}(R_m)$ в образцах **I** и **II**, полученные акустическим и оптическим методами совпали в пределах ошибок опыта.

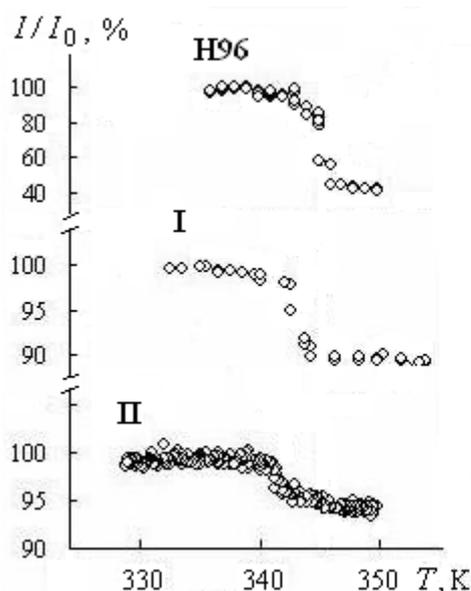


Таблица 1.

Зависимости $\Delta\alpha/f_{\max}^2(X_d)$ и $\Delta T_{2V}(R_m)$ для образцов I и II относительно H96

X_d , % vol.	$\Delta\alpha/f_{\max}^2 10^{15}$, $s^2 m^{-1}$	R_m , μm	ΔT_{2V} , К	
			акуст. метод	оптич. метод
100	3000	—	0	0
0.2	73	2.3	2.8	2.0
0.02	7	0.34	4.6	3.5

Рис. 7. Деполяризованная составляющая оптического пропускания для объемного образца H96 и образцов эмульсий I и II. Поляризаторы скрещены под углом 90 градусов.

С. Критические явления

Выполнен анализ температурной зависимости поглощения ультразвука в окрестности температуры фазового перехода в нематической и изотропной фазах. Анализ данных проводился по схеме ранее применявшейся при акустических исследованиях фазовых переходов в образцах ЖК макроскопических размеров [9, 24].

Из экспериментально найденных зависимостей $\alpha/f^2(T)$ для образцов I и II выделена «критическая» составляющая:

$$\Delta\alpha/f^2(T) = \alpha/f^2(T) - \alpha/f_b^2(T), \quad (6)$$

где $\alpha/f_b^2(T)$ - базовая линия, найденная аппроксимацией экспериментальных данных $\alpha/f^2(T)$ по точкам, взятым при температурах удаленных от T_{IN} на величину более 10 град. Экспериментальные данные по зависимости $\Delta\alpha/f^2(T)$ аппроксимированы простыми степенными функциями, в области нематической фазы:

$$\Delta\alpha/f^2 = a_I / (T - T_*)^\beta \quad (7)$$

и в области изотропной фазы:

$$\Delta\alpha/f^2 = a_N / (T_{**} - T)^{\beta_N}. \quad (8)$$

По аналогии со свойствами объемных ЖК [9] для ЖКЭ было принято: $T_* = T_{IN} - 1$ и $T_{**} = T_{IN} + 0,1$. В качестве температуры фазового перехода в каплях эмульсии $T_{IN}(R)$ принималась температура, соответствующая $\Delta\alpha/f_{\max}^2$ в ЖКЭ. Полученные результаты представлены на рис. 7 а, б Установлено, что зависимости $\Delta\alpha/f^2(T)$ при темпера-

турах $T < T_{**} - 2$ для образцов ЖКЭ I и II хорошо описываются простыми степенными функциями с критическими индексами примерно равными единице как в нематической фазе (рис. 7 а – 2, 4), так и в изотропной фазе (рис. 7 б – 3, 5), т.е. для ЖКЭ $\beta N \approx \beta I \approx 1$. Ранее такое поведение поглощения ультразвука было установлено для объемных образцов ЖК [9] и предсказывается теорией динамического скейлинга [24] в низкочастотном пределе. В области температур $T_{**} - 2 < T < T_{**}$ в нематической фазе в объемных ЖК наблюдается уменьшение критического индекса до значений $\beta N \approx 0,4$, что объясняется нарушением условия низкочастотного предела за счет замедления релаксационных процессов в критической области [9]. Это также качественно согласуется со свойствами ЖК эмульсий (рис. 7 а): для фрагмента зависимости 1 (образец I) получено $\beta N \approx 0.14$.

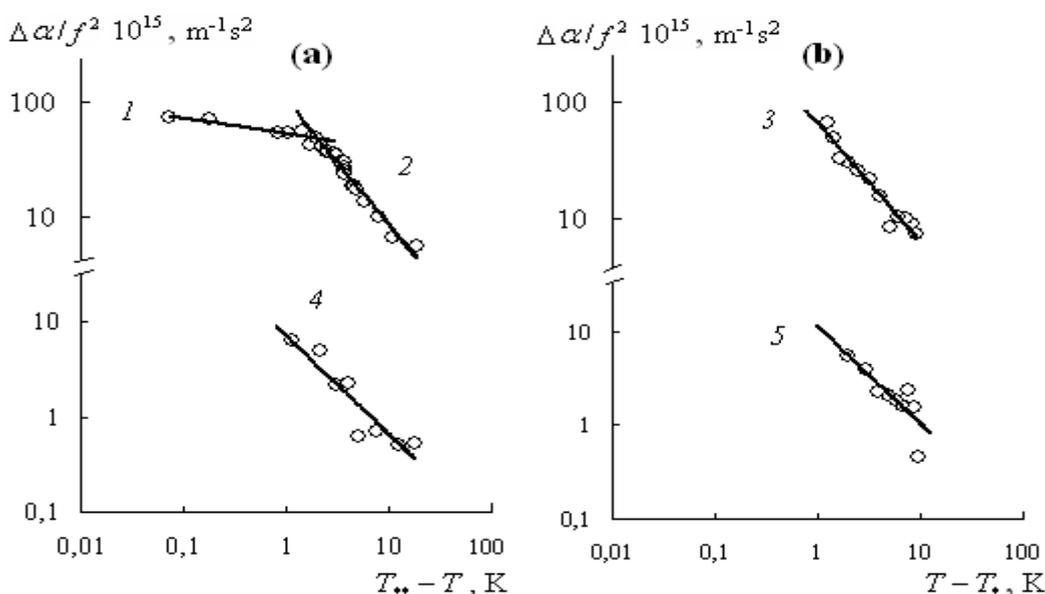


Рис. 7. Температурные зависимости параметра $\Delta\alpha/f^2$ для нематической (а) и изотропной (б) фаз образцов I (1-3) и II (4, 5).

Сплошные линии представляют аппроксимацию экспериментальных данных степенными функциями $\Delta\alpha/f^2 = a_N/(T_{**} - T)^{\beta N}$ (а) и $\Delta\alpha/f^2 = a_I/(T - T_*)^{\beta I}$ (б) при значениях критических индексов,

$$\begin{aligned} \beta N : & (1) 0.14 \pm 0.02 (R^2 = 0.85, \chi^2 = 23.7); \\ & (2) 1.06 \pm 0.07 (R^2 = 0.95, \chi^2 = 5.46); \\ & (4) 0.97 \pm 0.16 (R^2 = 0.907, \chi^2 = 0.526) \text{ и} \\ \beta I : & (3) 1.21 \pm 0.13 (R^2 = 0.945, \chi^2 = 20.2); \\ & (5) 0.95 \pm 0.11 (R^2 = 0.898, \chi^2 = 0.22). \end{aligned}$$

V. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен ультразвуковой метод изучения характеристик фазовых переходов и критической динамики в каплях жидких кристаллов микронных и субмикронных размеров, диспергированных в изотропных жидкостях. На примере эмульсии Н96/вода показано, что акустические свойства ЖК эмульсий с каплями дисперсной фазы микронных и субмикронных размеров и с малым объемным содержанием ЖК в эмульсии

(0,02..0,2%) по широкому спектру характеристик соответствуют свойствам объемных образцов жидких кристаллов. На примере жидкокристаллической эмульсии показана перспективность использования акустического метода для исследования характеристик фазовых переходов в ограниченных жидкокристаллических системах, а также критической динамики микро - и нанодисперсных фаз жидких кристаллов.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов: АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» 2.1.1/5873 и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 гг.» НК-410П/77.

ЛИТЕРАТУРА

1. Crawford G. P., Zumer S. Phase transitions in Restricted Geometries / In Liquid Crystals in Complex Geometries Formed by Polymers and Porous Networks. Ed. by G.P. Crawford and S. Zumer. Chap. 1. London: Taylor and Francis, 1996. P. 323 – 343.
2. Aliev F.M. and Breganov M.N. // Sov. Phys. JETP. 1989. Т. 66. С. 70 – 76.
3. Zidanšek A. et al. // Phys. Rev. E. 1995. Vol. 51. P. 3332 - 3340.
4. Kralj S., Zidanšek A., Lahajnar G., Žumer S. and Blinc R. // Phys. Rev. E. 1998. Vol. 57. P. 3021 - 3032.
5. Kuna Z., Kralj S., Lasagna C., Žumer S. // Rhys. Rev. E. 2003. Vol. 68. P. 021705-12.
6. Golemme A. et al. // Phys. Rev. A. 1988. V. 37. P. 559 - 569.
7. Kralj S., Žumer S., Allender D.W. // Phys. Rev. A. 1991. V. 43. 2943-2952.
8. Kralj S. and Žumer S., Phys. Rev. A. 45, 2461-2470, 1992.
9. Пасечник С.В., Баландин В.А., Прокопьев В.И., Шмелев О.Я. // ЖФХ. 1989. Т. 63, №2, С. 471-475.
10. Sporkach V.S., Glushenko A.V., Yaroshchuk O.V. // Mol. Cryst. & Liq. Cryst. 2000. Part 4. P. 463/3251.
11. Pasechnik S.V., Maksimochkin G.I., Tsvetkov V.A. // Book of abstr., 7th ECLC, Jaca, Spaine, 2003. P. 25.
12. Максимочкин Г.И., Пасечник С.В. // Труды 13-й Сессии Российского Акустического Общества (РАО), Москва, 2003. Т. 1, С. 178-181.
13. Богуславский Ю.А. // Акустический журнал. 1978. Т. 24. №1. С. 46.
14. Богданов Д.Л., Геворкян Э.В., Романов А.А., Шевчук М.В. // ЖТФ. 2004. Т. 74. Вып. 5. С. 118-120.
15. de Gennes P.G. and Prost J., The Physics of Liquid Crystals. Oxford University Press, Oxford, 1993.
16. Cleaver D. J. et al. // In Liquid Crystals in Complex Geometries formed by polymer and porous networks, eds. G. P. Crawford, S. Žumer. Taylor and Francis press, 1996. P. 467-476.
17. Yudin I.K., Anisimov M.A., Agayan V.A. и др. // Int. J. Thermophys. 1997. N. 18. P. 1237-1248.
18. Труэлл Р., Эльбаум Ч. Чик Б. Ультразвуковые методы в физике твердого тела. М.: Мир, 1972, 307 с.
19. Mason W.P. Physical acoustics and properties of solids. N.Y.: Acad. press, 1964. 418 с
20. Голенищев-Кутузов В.А, Самарцев В.В., Хабибуллин Б.М. Импульсная оптическая и акустическая когерентная спектроскопия. М.: Наука, 1988. 224 с.

21. Максимочкин Г.И. // Труды 13-й Сессии Российского Акустического Общества (РАО), Москва, 2003. Т. 1, С. 69-72.
22. Ландау Л.Д., Халатников И.М. ДАН СССР. 1954. Т. 96. 469. 19. Kralj S. and Popa-Nita V., Eur. Phys. J. E **14**, 71 (2004)
23. Ларионов А.Н. Влияние давления на динамику ориентационных процессов в нематических жидких кристаллах. Докт. дисс., М., МГОУ, 2008. 246 с.
24. Анисимов М.А., Воронов В.П., Гольденштейн А.С. и др. // ЖЭТФ. 1984. Т. 87. С. 1969.

ULTRASOUND STUDY OF PHASE TRANSITIONS IN LIQUID CRYSTAL EMULSIONS

G. Maksimochkin,^{*} S. Pasechnik,^{**} S. Kralj^{***}

^{*} *Moscow State University of Instrument Engineering and Computer Science, Russia*

^{**} *Moscow State University of Instrument Engineering and Computer Science, Russia*

^{***} *University of Maribor, Slovenia*

Abstract: The velocity of propagation and the coefficient of absorption of ultrasound, at frequency 2.7 MHz, in emulsions of liquid crystal (LC) N96 in water has been studied using samples with sizes of droplets in the range from 200 to 5000 nm (sample I) and from 200 to 1500 nm (sample II). The possibility of an acoustic study of characteristics of phase transition from nematic to isotropic phase and critical dynamics of LC in droplets of both microns and submicrons sizes is shown using analyze of ultrasound characteristics of LC emulsions.

Key words: liquid crystal emulsions, liquid crystal droplets, ultrasound measurements, phase transitions

УДК 537.8

ПРЯМОУГОЛЬНЫЙ ВОЛНОВОД С ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ПЕРИОДИЧЕСКИ ЗАПРЕДЕЛЬНОЙ УСИЛИВАЮЩЕЙ СРЕДОЙ

Е.П. Захарченко

Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики (ПГУТИ) г. Самара

Аннотация. Многослойные периодические структуры широко применяются в устройствах различных частотных диапазонов и сравнительно подробно исследованы в области прозрачности сред. В этой работе получены дисперсионные характеристики двухкомпонентной структуры с запредельным слоем усиливающей среды. Установлено, что введение среды с усилением позволяет получить дисперсионные характеристики с постоянным по частоте коэффициентом усиления.

Ключевые слова: периодические структуры, запердельные среды.

При распространении электромагнитных волн в периодических средах возникает много интересных и потенциально полезных физических явлений [1-2]. Пространственно периодические структуры сравнительно хорошо изучены в зонах пропускания, составляющих их сред. Значительно менее изучены вопросы затухания и усиления волн, особенности распространения и прохождения волн в пространственно ограниченных структурах. В [3-4] исследованы возможности режима распространения электромагнитных волн и управления их спектром в периодических структурах, заполненных тонкими слоями полупроводников (GaAs, InSb и др.). Показано, что основная полоса пропускания такой периодической структуры типа фотонного кристалла лежит одновременно существенно ниже как частоты отсечки собственно волновода, так и частоты, соответствующей плазменному резонансу в полупроводниковом материале. В связи с возникшим сравнительно недавно вниманием к запердельным структурам с усиливающими средами, особый интерес представляют физические свойства и потенциальные возможности периодических структур с запердельными участками усиливающих сред, которые рассмотрены в настоящей работе.

Рассмотрим распространение электромагнитных волн в прямоугольном волноводе, в который перпендикулярно его оси включена периодическая структура, составленная из диэлектриков и полупроводящих сред с комплексными диэлектрическими проницаемостями ε_1 и ε_2 , с толщиной слоев d_1 и d_2 (рис.1). Анализ периодической структуры проводится с помощью передаточных матриц. Для получения передаточной матрицы учитываются условия непрерывности для тангенциальных компонент электрического и магнитного полей в плоскостях раздела слоев различных сред. Волновые уравнения для H и E волн могут быть представлены в виде уравнений второго порядка с периодическим коэффициентом (уравнение Хилла):

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - k_x^2 + k_0^2 \varepsilon_i(z) \mu_i \right] \begin{bmatrix} E_y(z) \\ H_y(z) \end{bmatrix} = 0,$$

где $i=1,2$ – индекс слоя.

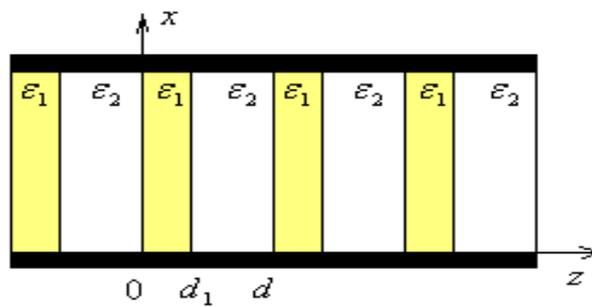


Рис. 1. Прямоугольный волновод с периодической структурой
Дисперсионное уравнение для H-волн.

Учет граничных условий при $z = 0$ позволяет выразить компоненты поля $E_y(0)$ и $H_x(0)$ в плоскости $z = 0$ через компоненты поля $E_y(z)$ и $H_x(z)$ в виде:

$$\begin{bmatrix} E_{y1}(0) \\ H_{x1}(0) \end{bmatrix} = m_1(z) \begin{bmatrix} E_{y1}(z) \\ H_{x1}(z) \end{bmatrix},$$

где

$$m_1(z) = \begin{bmatrix} \cos k_{z1}z & -\frac{ik_0}{k_{z1}} \sin k_{z1}z \\ -\frac{ik_{z1}}{k_0} \sin k_{z1}z & \cos k_{z1}z \end{bmatrix}.$$

Матрица $m_1(z = d_1)$ является матрицей преобразования компонент поля для первого слоя. Аналогично может быть получена матрица преобразования поля для второго слоя $m_2(d_2)$. Для системы двух слоев структуры:

$$\begin{bmatrix} E_y(0) \\ H_x(0) \end{bmatrix} = m(d) \begin{bmatrix} E_y(d) \\ H_x(d) \end{bmatrix},$$

где матрица преобразования $m = m_1 \cdot m_2$ одного периода структуры:

$$m_{11} = \cos k_{z1}d_1 \cdot \cos k_{z2}d_2 - \frac{k_{z2}}{k_{z1}} \sin k_{z1}d_1 \cdot \sin k_{z2}d_2,$$

$$m_{12} = -ik_0 \left(\frac{1}{k_{z2}} \cos k_{z1}d_1 \cdot \sin k_{z2}d_2 + \frac{1}{k_{z1}} \sin k_{z1}d_1 \cdot \cos k_{z2}d_2 \right),$$

$$m_{21} = -\frac{i}{k_0} (k_{z1} \sin k_{z1}d_1 \cdot \cos k_{z2}d_2 + k_{z2} \cos k_{z1}d_1 \cdot \sin k_{z2}d_2),$$

$$m_{22} = \cos k_{z1}d_1 \cdot \cos k_{z2}d_2 - \frac{k_{z1}}{k_{z2}} \sin k_{z1}d_1 \cdot \sin k_{z2}d_2,$$

$k_{z1}^2 = k_0^2 \epsilon_1 \mu_1 - k_x^2$, $k_{z2}^2 = k_0^2 \epsilon_2 \mu_2 - k_x^2$. Решение волнового уравнения для периодической структуры удовлетворяет условию периодичности:

$$\begin{bmatrix} E_y(z=0) \\ H_x(z=0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_y(z=d) \\ H_x(z=d) \end{bmatrix} \cdot \exp(i\bar{k}d),$$

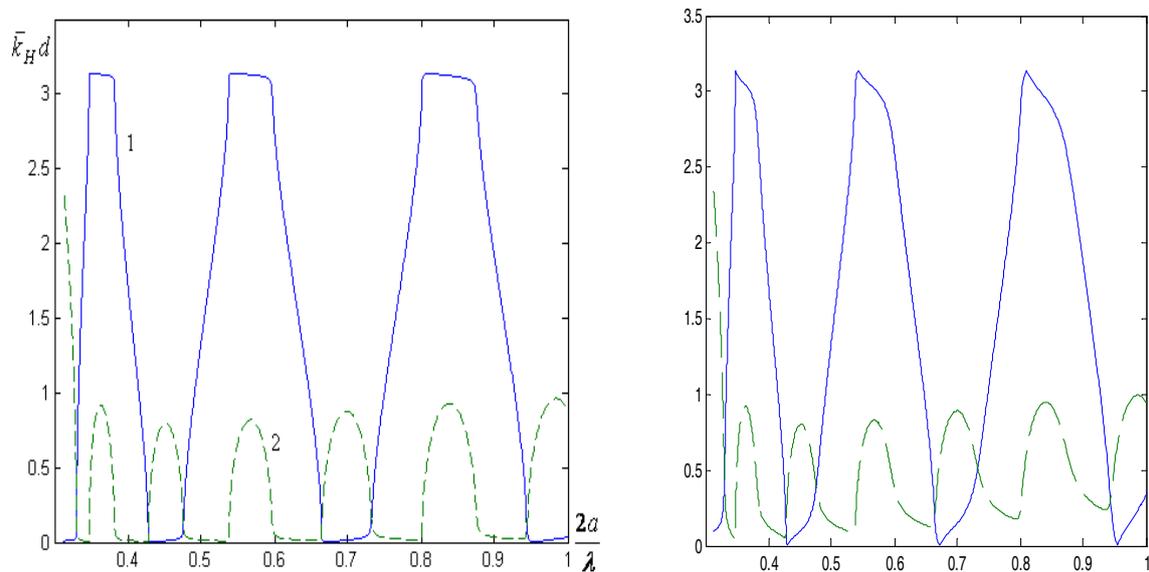
где \bar{k} - это волновое число Блоха (усредненное волновое число периодической структуры). Последнее уравнение в сочетании с предыдущим могут быть представлено в виде уравнения на нахождение собственных векторов F и собственных чисел матрицы λ : $[m]F - \lambda F = 0$ с компонентами вектора

$F(E_y, H_x)$, а $\lambda = \exp(i\bar{k}d)$. Уравнение для собственных чисел λ имеет вид: $\lambda^2 - \lambda(m_{11} + m_{22}) + 1 = 0$, которое с заменой $\lambda + \lambda^{-1} = 2\cos\bar{k}d$ является дисперсионным уравнением для H - волн в периодической структуре:

$$\cos\bar{k}_H d = \cos k_{z1} d_1 \cos k_{z2} d_2 - \frac{1}{2} \left(\frac{k_{z1}}{k_{z2}} + \frac{k_{z2}}{k_{z1}} \right) \sin k_{z1} d_1 \sin k_{z2} d_2,$$

относительно волнового числа \bar{k}_H , компоненты волновых чисел

$$k_{z1} = k_0 \sqrt{\varepsilon_1' - \left(\frac{n\lambda}{2a} \right)^2}, \quad k_{z2} = k_0 \sqrt{\varepsilon_2' - \left(\frac{n\pi\lambda}{2\pi a} \right)^2 + i\varepsilon_2''}.$$



а)

б)

Рис. 2. Дисперсионные характеристики волновода с периодической структурой: диэлектрик - запредельная среда с усилением:

а- $\varepsilon_2'' = 0.1$, б)- $\varepsilon_2'' = 1$ (1- $\bar{k}'_H d$, 2- $\bar{k}''_H d$, $\varepsilon_1' = 10$, $\varepsilon_2' = 2$, $\varepsilon_1'' = 0$ $d_1 = \frac{6a}{\pi}$, $d_2 = \frac{a}{\pi}$, $n=1$).

На рис.2 (а,б) показаны дисперсионные характеристики прямоугольного волновода, заполненного периодической структурой: диэлектрик - активная среда. Видна ярко выраженная периодичность параметров с изменением длины волны. Плоские участки характеристики действительной части волнового числа $\bar{k}'_H d \ll 1$ (кривая 1) соответствуют запредельным областям частот. В этих областях частот мнимая часть волнового числа положительна – наблюдается усиление (кривая 2), величина которого пример-

но одинакова во всех полосах усиления. В области частот, запредельной для обеих частей волновода, заполненного средами 1 и 2 ($2a/\lambda \leq 0.1$), наблюдается рост усиления. С ростом параметра активности среды ε_2'' наблюдается деформация характеристик мнимой части волнового числа – расширяются области усиления (рис.2 (б)). Отметим, что действительная часть волнового числа мало зависит от величины и знака параметра активности ε_2'' .

Дисперсионное уравнение для E- волн.

Для E волн связь между компонентами поля в плоскостях раздела сред $z = 0$, $z = d$ представим в виде:

$$\begin{bmatrix} H_y(0) \\ E_x(0) \end{bmatrix} = m(d) \begin{bmatrix} H_y(d) \\ E_x(d) \end{bmatrix},$$

где компоненты матрицы перехода

$$\begin{aligned} m_{11} &= \cos k_{z1}d_1 \cdot \cos k_{z2}d_2 - \frac{\sqrt{\varepsilon_1}k_{z2}}{\sqrt{\varepsilon_2}k_{z1}} \sin k_{z1}d_1 \cdot \sin k_{z2}d_2, \\ m_{12} &= -\frac{k_0\sqrt{\varepsilon_1}}{k_{z2}} \cos k_{z1}d_1 \cdot \sin k_{z2}d_2 - \frac{k_0\sqrt{\varepsilon_2}}{k_{z1}} \sin k_{z1}d_1 \cdot \cos k_{z2}d_2, \\ m_{21} &= \frac{k_{z1}}{k_0\sqrt{\varepsilon_1}} \sin k_{z1}d_1 \cdot \cos k_{z2}d_2 + \frac{k_{z2}}{k_0\sqrt{\varepsilon_1}} \cos k_{z1}d_1 \cdot \sin k_{z2}d_2, \\ m_{22} &= \cos k_{z1}d_1 \cdot \cos k_{z2}d_2 - \frac{k_{z1}\sqrt{\varepsilon_2}}{k_{z2}\sqrt{\varepsilon_1}} \sin k_{z1}d_1 \cdot \sin k_{z2}d_2. \end{aligned}$$

Дисперсионное уравнение E- волн имеет вид:

$$\cos \bar{k}_{E}d = \cos k_{z1}d_1 \cos k_{z2}d_2 - \frac{1}{2} \left(\frac{k_{z1}\sqrt{\varepsilon_2}}{k_{z2}\sqrt{\varepsilon_1}} + \frac{k_{z2}\sqrt{\varepsilon_1}}{k_{z1}\sqrt{\varepsilon_2}} \right) \sin k_{z1}d_1 \sin k_{z2}d_2$$

Предельный переход к однородной среде показывает, что

$$\cos \bar{k}_{E,H}d = \cos k_z(d_1 + d_2)$$

и блоховское волновое число переходит в волновое число однородной среды $\bar{k}_{E,H} = k_z$. Таким образом, блоховский волновой вектор $\bar{k}_{E,H}$ в периодической структуре играет роль z компоненты усредненного волнового вектора для волновых векторов первой k_{z1} и второй k_{z2} сред. На рис.3 представлена дисперсионная характеристика для E волн в прямоугольном волноводе с периодической структурой.

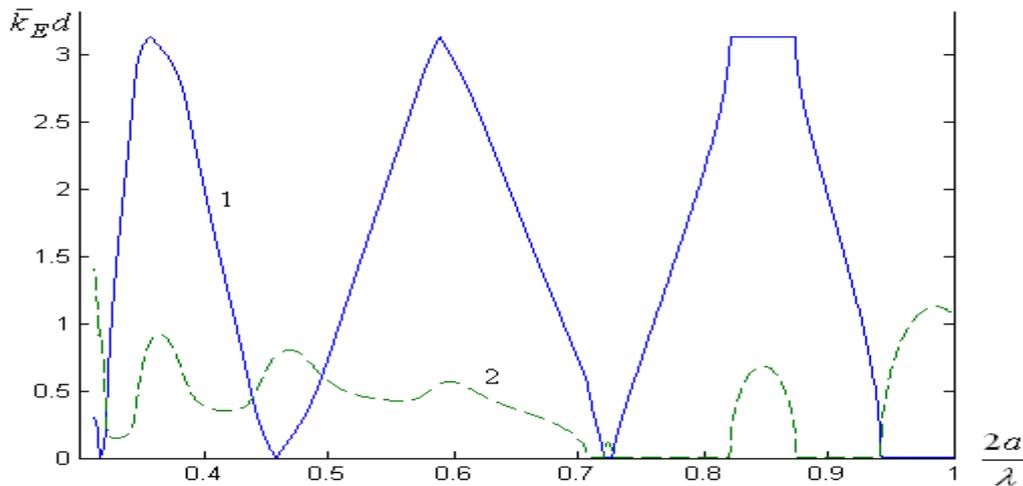


Рис. 3. Дисперсионные характеристики Е волн волновода с периодической структурой: диэлектрик - запердельная усиливающая среда

$$(1- \bar{k}'_E d, 2- \bar{k}''_E d, \varepsilon_2'' = +0.001, d_1 = \frac{6a}{\pi}, d_2 = \frac{a}{\pi}, \varepsilon_1 = 10, \varepsilon_2 = 2, n=1)$$

Полученные дисперсионные характеристики показывают новые возможности использования периодических структур с усиливающими полупроводниковыми слоями с запердельными параметрами в качестве управляемых полосовых фильтрующих устройств с усилением.

ЛИТЕРАТУРА

1. Нефедов Е.И., Сивов А.И. Электродинамика периодических структур.- М.: Наука, 1978.- 208 с.
2. Силин Р.А. Периодические волноводы.- М.: Фазис, 2002.- 436 с.
3. Басс Ф.Г., Булгаков А.А., Тетервов А.П. Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками.- М.: Наука, 1989.- 195с.
4. Альтшулер Е.Ю., Нефедов И.С. Управление спектром блоховских волн ближнего поля в волноводе, периодически нагруженном тонкими слоями InSb.// Радиотехника и электроника.- 2008.-Т.53.- №1.- С.67-69.

RECTANGULAR WAVE GUIDE WITH TWO-COMPONENTAL PERIODICALLY EVANESCENT STRENGTHENING ENVIRONMENT

E. Zaharchenko

Volga State University of Telecommunications and Informatics, Samara, Russia

Abstract. Multilayered periodic structures are widely applied in devices of various frequency ranges and comparative are in detail investigated in the field of a transparency of environments. In this work dispersive characteristics of two-componental structure with an evanescent layer of the strengthening environment are received. It is established, that introduction of environment with strengthening allows to receive structures with constant on frequency in factor of strengthening.

Keywords: periodic structures, evanescent environments.

УДК 532.783

ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ЦИАНОЭТИЛОВЫЕ ЭФИРЫ**В. Ф. Петров^{*}, В. В. Беляев^{**}**

** РГУ нефти и газа им. И. М. Губкина
119991, Москва, Ленинский проспект. 65,*

*** Московский Государственный Областной Университет
105005, Москва, ул. Радио. 10А*

Аннотация: Представлены мезоморфные и физико-химические свойства новых жидкокристаллических цианоэтиловых эфиров. Обсуждена связь полученных результатов с молекулярной структурой исследуемых соединений.

Ключевые слова: жидкие кристаллы, молекулярная структура, цианоэтиловые эфиры.

1. Мезоморфные свойства

Для физико-химических исследований и практических приложений мезофаз актуальной задачей остается создание новых жидкокристаллических (ЖК) веществ и исследование зависимости их физических свойств и электрооптических характеристик от молекулярной структуры мезогенов. Такие исследования также стимулируют разработку соответствующих новых физических теорий и моделей.

В продолжение наших работ в области сильно полярных жидких кристаллов для электрооптических устройств [1-8], мы проводим в табл. 1 мезоморфные и физико-химические свойства новых цианоэтиловых эфиров производных бифенила, фенилциклогексана и бициклогексана. Свойства новых веществ сравниваются с соответствующими свойствами циан, цианэтил, цианвинил и цианацетил производных.

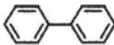
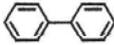
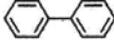
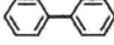
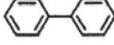
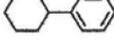
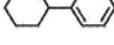
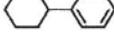
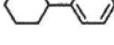
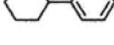
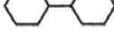
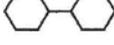
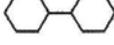
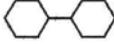
Как видно из таблицы, введение мостиковой группы C_2H_4COO между молекулярным остовом и концевой циано группой приводит к уменьшению температуры просветления (температуры фазового перехода нематик-изотропная жидкость T_{NI}), по сравнению с соответствующими параметрами циано производных (соединения **1** и **2**, **6** и **7**, **11** и **12**) и других производных, имеющих метильную, виниловую и ацетиленовую мостиковые группы (соединения **1** и **4,5**; **6** и **9, 10**; **11** и **14**). В то же время новые соединения показывают более высокие (соединения **1** и **3**, **6** и **8**) и более низкие температуры просветления (соединения **11** и **13**), чем соответствующие производные с этиловым мостиком. Эти данные связаны с изменением формы молекул – увеличивается отклонение полярной CN-группы от длинной оси остова молекулы, что приводит к уменьшению нематической термостабильности.

Температура плавления (температура фазового перехода кристалл-нематик T_{CN} или кристалл-смектик T_{SN}) новых веществ больше температур плавления соответствующих производных фенилциклогексила и бициклогексила (соединения **6-10**, **11-14**), а для производных бифенила соединения с виниловым мостиком обладают наибольшими

Таблица 1.

Мезоморфные и физико-химические свойства жидких кристаллов:

C₅H₁₁-A-B-X-CN

№	A-B	X	Темп. фаз. переходов, °C	ϵ_{\perp}^a	$\Delta\epsilon^a$	Δn^a	v^a , мм ² с ⁻¹	Лит.
1		COOC ₂ H ₄	Cr 65,3 N (26) I	8,7	11,3	0,183		
2		—	Cr 23 N 35 I	5,6	14,8	0,204		[3]
3		C ₂ H ₄	Cr 66,5 I					[19]
4		CH=CH	Cr 80 S 99 N 147,1 I					[20]
5		C≡C	Cr 51 N 120,2 I					[20]
6		COOC ₂ H ₄	Cr 56,8 N (35) I	8,0	9,2	0,115	150	
7		—	Cr 30 N 55 I	4,2	13,3	0,130	23	[3]
8		C ₂ H ₄	Cr 44,2 S (28) I					[20]
9		CH=CH	Cr 40,6 S 59,5 N 149 I					[20]
10		C≡C	Cr 49,7 N 128,9 I					[20]
11		COOC ₂ H ₄	Cr 117,3 N (59) I	6,4	2,8	0,044		
12		—	Cr 60 S (43) S (52) N 85 I		4,5	0,060		[3]
13		C ₂ H ₄	Cr 9 S 30 S 108,8 I					[21]
14		CH ₂	Cr 56,5 S 82,6 I					[22]

^a Вычислено из 10 масс. % раствора в ZLI-1132 при 20 °C.

температурами плавления среди рассматриваемых веществ. Эти результаты свидетельствуют о влиянии структуры молекулярного остова (бифенил, фенилциклогексил, бифенилциклогексил) на термическую эффективность C_2H_4COO и других мостиковых групп.

2. Статические диэлектрические свойства

Отношение между диэлектрической анизотропией $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$, где ε_{\parallel} и ε_{\perp} - соответственно, диэлектрические константы, параллельная и перпендикулярная нематическому директору \mathbf{n} ; и молекулярной структурой жидких кристаллов описывается теорией Майера и Мейера [9]:

$$\Delta\varepsilon = NhF/\varepsilon_0 [\Delta\alpha - F\mu^2/kT(1-3\cos^2\beta)]S, \quad (1)$$

где $h = 3\varepsilon^*/(2\varepsilon^* + 1)$, $\varepsilon^* = (\varepsilon_{\parallel} + 2\varepsilon_{\perp})/3$; $\Delta\alpha = (\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp})$ - анизотропия поляризуемости; F - отклик системы; μ - дипольный момент; β - угол между дипольным моментом и длинной осью молекулы; N - число молекул в единице объема; S - параметр порядка.

Для жидкокристаллических дисплеев, работающих на твист-эффекте, нужны жидкие кристаллы, имеющие наибольшую диэлектрическую анизотропию [10]:

$$U_{th} \sim \pi[\kappa/\varepsilon_0\Delta\varepsilon]^{1/2} \quad (2)$$

где κ параметр упругости, являющийся комбинацией коэффициентов упругости Фрэнка, $\kappa = [K_{11} + (K_{33} - 2K_{22})/4]$.

В ЖК с положительной диэлектрической анизотропией дипольный момент направлен вдоль длинной молекулярной оси, в то время как в ЖК с отрицательной диэлектрической анизотропией дипольный момент ориентирован перпендикулярно длинной молекулярной оси. С точки зрения молекулярного дизайна положительное значение $\Delta\varepsilon$ может быть достигнуто введением в молекулярную структуру полярных концевых и мостиковых групп. Положение и ориентация мостиковых групп должны быть выбраны таким образом, чтобы их дипольные моменты увеличивали общий дипольный момент и, следовательно, диэлектрическую анизотропию, которая в свою очередь уменьшает управляющее напряжение (формула 2). В таблице 1 представлены значения диэлектрической анизотропии жидких кристаллов, экстраполированные из растворов при 20°C. Как было показано в [10], эти экстраполяции не эффективны, однако это единственная возможность для грубой оценки диэлектрических и оптических свойств не жидкокристаллических соединений, смектических ЖК и ЖК с узким нематическим интервалом. Как видно из табл. 1, введение мостиковой группы C_2H_4COO в структуру ЖК приводит к увеличению перпендикулярной составляющей диэлектрической анизотропии и уменьшению $\Delta\varepsilon$, что вызвано соответствующим вкладом дипольного момента COO группы (соединения 1 и 2, 6 и 7, 11 и 12).

3. Оптические свойства

Отношение между показателем преломления и электрической поляризацией определяется как [11, 12]:

$$(n^{*2} - 1) / (n^{*2} + 2) = N\alpha^* / 3\varepsilon_0 \quad (3)$$

где средняя поляризуемость $\alpha^* = (\alpha_{\parallel} + 2\alpha_{\perp}) / 3$; средний показатель преломления $n^{*2} = (n_e^2 + 2n_o^2) / 3$; n_o это обыкновенный и n_e это необыкновенный показатели преломления. Из формулы 3 и предыдущего параграфа следует, что соединения, имеющие большую индуцированную поляризуемость их π -электронных систем (например, циано производные) показывают оптическую анизотропию $\Delta n = n_e - n_o$, которая существенно больше, чем оптическая анизотропия соответствующих цианоэтиловых эфиров (соединения 1 и 2, 6 и 7, 11 и 12).

4. Вязкость

Как известно, нематические жидкокристаллические материалы для дисплеев должны иметь малую вязкость для обеспечения приемлемых времен переключения дисплеев [10, 13]:

$$\tau_{off} = \gamma_1 d^2 / \pi^2 K_1, \quad (4)$$

$$\tau_{on} \sim \gamma_1 d^2 / (U^2 - U_{th}^2), \quad (5)$$

где d - толщина ЖК слоя, U - напряжение, U_{th} - пороговое напряжение электрооптического эффекта. Вращательная вязкость γ_1 нематического ЖК это коэффициент диссипации энергии, описывающий степень переориентации директора ЖК [14]. Величина вращательной вязкости зависит от молекулярной структуры, междумолекулярной ассоциации и температуры [15, 16]: с увеличением температуры вязкость уменьшается [14-18]. В табл.1 приведены данные по кинематической вязкости ЖК ν . В [23] показано, что величины γ_1 и ν коррелируют при изменении молекулярной структуры соединений. Как видно из табл. 1, цианоэтиловые эфиры с более длинной концевой группой, как и ожидалось, обладают значительно большей вязкостью, чем соответствующие циано производные (соединения 6 и 7).

5. Заключение

Проведены систематические исследования влияния молекулярной структуры жидкокристаллических цианоэтиловых эфиров на их свойства. Показано, что введение этил-эфирной группы между циан-группой и фенильным или циклогексановым фрагментом приводит к уменьшению температуры просветления, диэлектрической и оптической анизотропии, увеличению вязкости по сравнению с аналогичными соединениями. Представленная здесь информация может обеспечить более качественный молекулярный дизайн жидких кристаллов для электрооптических дисплеев.

ЛИТЕРАТУРА

1. Grebenkin M.F., Petrov V. F., Belyaev V. V., Pavluchenko A. I., Smirnova N. I., Kovshev E. I., Titov V. V., Ivashchenko A. V. Synthesis and properties of 5-alkyl-2-(4-цианопенил)пиридины // Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1985, V. 129, P. 245-257.
2. Петров В. Ф., Гребенкин М. Ф. Влияние молекулярной структуры жидких кристаллов на их физико-химические свойства I. Полярные производные пиридина // Ж. физ. хим., 1991, № 10, С. 1356-1359.

3. Петров В. Ф., Гребенкин М. Ф., Карамышева, Л. А., Гейвандов Р. Х. Влияние молекулярной структуры жидких кристаллов на их физико-химические свойства II. Полярные производные циклопентана и циклогексана // Ж. физ. хим., 1991, № 10, С. 1359-1362.
4. Петров В. Ф., Павлюченко А. И., Гребенкин М. Ф., Смирнова Н. И. Влияние молекулярной структуры жидких кристаллов на их физико-химические свойства III. Полярные производные 5,6,7,8-тетрагидрохинолина // Ж. физ. хим., 1991, № 12, С. 2246-2248.
5. Pavluchenko A. I., Smirnova N. I., Petrov V. F., Grebyonkin M. F., Titov V. V. Liquid crystal pyridine derivatives of high positive dielectric anisotropy // Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1991, V. 209, P. 155-169.
6. Bezborodov V. S., Petrov V. F., Lapanik V. I. Liquid crystalline oxygen containing heterocyclic derivatives // Liquid Crystals, 1996, V. 20, № 6, P. 785-796.
7. Duan M., Tasaka T., Okamoto H., Petrov V. F., Takenaka S. Liquid crystalline properties of dissymmetric molecules IV. The substituent effect on thermal properties of nematic and smectic A phases in three aromatic ring systems with ester linkages // Liq. Cryst., 2000, V. 27, No. 9, P. 1195-1205.
8. Petrov V. F., Shimizu Y. Nitro substitution in achiral calamitic liquid crystals // Liq. Cryst., 2001, V. 28, No. 11, P. 1627-1647.
9. Schad Hp., Baur G., Meier G. Investigation of the dielectric constants and the diamagnetic anisotropies of cyanobiphenyls (CB), cyanophenylcyclohexanes (PCH), and cyanocyclohexylcyclohexanes (CCH) in the nematic phase // J. Chem. Phys., 1979, V. 71, No. 8, P. 3174-3181.
10. Schadt M. Liquid-crystal displays and liquid-crystal materials: key technologies of the 1990s // Displays, 1992, V. 13, No. 1, P. 11-34.
11. de Jeu W. H. Physical Properties of Liquid Crystalline Materials, 1980. New York: Gordon & Breach, 134 p.
12. de Jeu W. H., Gerristma C. J., van Zanten P., Goosens W. A. Relaxation of the dielectric constant and electrohydro-dynamic instabilities in a liquid crystal // Phys. Lett. A, 1972, V. 39, No. 5, P. 355-356.
13. Jakeman E., Raynes E. P. Electro-optic response in liquid crystals // Phys. Lett. A, 1972, V. 39, P. 69-70.
14. de Gennes P. G., Prost J. The Physics of Liquid Crystals, Oxford: Clarendon Press, 1993, 596 p.
15. Wu S.-T., Wu C.-S. Experimental conformation of the Osipov-Terentjev theory on the viscosity of nematic liquid crystals // Phys. Rev. A, 1990, V. 42, No. 4, P. 2219-2227.
16. Беляев В. В. Вязкость нематических жидких кристаллов // Успехи химии, 1989, Том 58, No. 10, С. 1601-1670.
17. Constant J., Raynes E. P. Flow viscosities of cyanobiphenyls // Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1980, V. 62, P. 115-123.
18. Diogo A. C., Martins A. F. Thermal behaviour of the twist viscosity in a series of homologous nematic liquid crystals // Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1981, V. 66, P. 133-146.
19. Dabrowski R., Zytynki E. Mesomorphic properties of 4-n-pentylbiphenyl derivatives // Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1982, V. 87, P. 109-135.

20. *Petrzilka M.* Polar acetylenic liquid crystals with broad mesomorphic ranges. The positional influence of different C, C – elements on the transitional temperatures // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 1984, V. 111, P. 329-346.
21. *Osman M. A., Hynh-Ba T.* Aliphatic liquid crystals with positive dielectric anisotropy // *Hel. Chim. Acta*, 1984, V. 67, № 4, P. 959-963.
22. *Osman M. A.* Substituted terminal alkyl groups and their prospects in liquid crystal chemistry // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 1985, V. 131, P. 353-360.
23. *Беляев В. В.* Вязкость нематических жидких кристаллов, М:Физматлит, 2002.

LIQUID CRYSTALLINE CYANOETHYL ESTERS

V. Petrov^{*}, V. Belyaev^{*}

** Gubkin Russian State University of Oil and Gas
65 Leninsky prospect, Moscow 119991, Russia;*

** Moscow State Region University
10a Radio St., Moscow 105005 Russia*

Abstract. We report the mesomorphic and physic-chemical properties of some liquid crystalline cyanoethyl esters. The influence of the molecular structure of these compounds on their properties is discussed.

Keywords: liquid crystals, molecular structure, cyanethyl esters.

НАШИ АВТОРЫ

Беляев Виктор Васильевич - Московский государственный областной университет, 105005, Москва, ул. Радио, 10а, заведующий кафедрой Теоретической физики, заведующий лабораторией нанотехнологий, доктор технических наук старший научный сотрудник vic_belyaev@mail.ru.

Богачева Елена Николаевна - Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник, ben@chph.ras.ru.

Богданова Софья Борисовна - Московский государственный областной университет, 105005, Москва, ул. Радио, д. 10а, аспирантка, sonjaf@list.ru

Гладков Сергей Октябрьнович - Московский государственный областной университет, 105005 г. Москва, ул. Радио, д. 10а, профессор кафедры математического анализа и геометрии, доктор физико-математических наук профессор sglad@newmail.ru.

Гусев Александр Николаевич - Московский государственный областной университет, 105005 г. Москва, ул. Радио, д. 10а, доктор технических наук, профессор.

Долгов Алексей Александрович, Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, кандидат химических наук, старший научный сотрудник, dolgov48@nm.ru

Евстигнеев Николай Михайлович - Институт системного анализа РАН, Москва, старший научный сотрудник

Захаров Михаил Юрьевич - ОАО «НПО «Промавтоматика», 350051, г. Краснодар, ул. Гаражная, 156, ОАО «НПО «Промавтоматика»; (861) 279-48-79; ведущий математик сектора математического обеспечения автоматизированных систем управления (АСУ) технологических процессов отдела проектирования АСУ технологических процессов и комплексной автоматизации; zakharovmyu@mail.ru

ЗахарченкоЕвгения Павловна - Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики (ПГУТИ), г. Самара, кафедра физики, старший преподаватель, zep646@yandex.ru

Краль (Kralj) Само (Samo) – University of Maribor (университет Марибор), Department of Physics, Faculty of Education, University of Maribor (Кафедра физики, факультет образования), доктор философии, профессор.

Максимочкин Геннадий Иванович – Московский государственный университет приборостроения и информатики, Проблемная лаборатория молекулярной акустики, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник; maksgi2@mail.ru

Мартынюк Алексей Николаевич - Московский государственный областной университет, 105005 г. Москва, ул. Радио, д. 10а, доцент кафедры вычислительной математики и МПИ, кандидат физико-математических наук, martynyuk@nm.ru

Матвеев Олег Александрович - Московский государственный областной университет, 105005 г. Москва, ул. Радио, д. 10а, доцент кафедры математического анализа и геометрии, кандидат физико-математических наук, veyevtam@mail.ru

Нестеренко Елена Леонидовна – Московский государственный областной университет, 105005 г. Москва, ул. Радио, д. 10а, аспирантка кафедры математического анализа и геометрии, nestelena@inbox.ru

Пасечник Сергей Вениаминович - Московский государственный университет приборостроения и информатики, профессор кафедры медицинских приборов и компьютерных технологий, доктор физико-математических наук, профессор, s-p-a-s-m@mail.ru

Петров В.Ф. - РГУ нефти и газа им. И. М. Губкина, кафедра физической химии, 119991, Москва, Ленинский проспект, 65.

Семенчин Евгений Андреевич - Кубанский государственный университет, 350040, г.Краснодар, ул. Ставропольская, 149, заведующий кафедрой высшей алгебры и геометрии, доктор физико-математических наук, профессор, es14@mail.ru

Шишков Александр Владимирович, Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, доктор химических наук, профессор, зав. отделом, avs@chph.ras.ru

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

<i>Нестеренко Е.Л.</i> Пространства аффинной связности с обобщенным алгебраическим свойством Муфанг	3
<i>Матвеев О.А.</i> Топологические реляционные системы	9
<i>Матвеев О.А., Нестеренко Е.Л.</i> О локально инвариантных пространствах аффинной связности	19
<i>Мартынюк А.Н., Матвеев О.А.</i> Эквивалентность категорий моделей и универсальных алгебр, как основа построения алгоритмов обработки реляционных баз знаний	28
<i>Захаров М.Ю., Семенчин Е.А.</i> Приближенное решение плоских краевых задач с нелинейным уравнением диффузии в изотропной среде	35
<i>Евстигнеев Н.М.</i> Об одном способе осреднения уравнений сжимаемой и несжимаемой жидкости	47
<i>Евстигнеев Н.М.</i> О стабилизации сеточного метода Больцмана для высоких чисел Рейнольдса при моделировании турбулентного режима течения жидкости ..	53
<i>Гусев А.Н.</i> Обнаружение полиномиального алгоритма решения <i>NP</i> задачи многомерного прогнозирования в режиме параллельных вычислений	63

ФИЗИКА

<i>Богданова С.Б., Гладков С.О.</i> О вычислении продольной магнитной восприимчивости фрактальных ферродиелектриков	76
<i>Богачева Е.Н., Долгов А.А., Шишков А.В.</i> Третьевая планиграфия: методика, области применения, некоторые результаты	81
<i>Максимочкин Г.И., Пасечник С.В., Краль С.</i> Ультразвуковые исследования фазовых переходов в эмульсиях жидких кристаллов	89
<i>Захарченко Е.П.</i> Прямоугольный волновод с двухкомпонентной периодически запердельной усиливающей средой	101
<i>Петров В.Ф., Беляев В.В.</i> Жидкокристаллические цианоэтиловые эфиры	107

НАШИ АВТОРЫ	113
-------------------	-----

CONTENTS

MATHEMATICS

<i>Nesterenko H.</i> affinely connected spaces with generalized algebraic Moufang property	3
<i>Matveyev O.</i> Topological relational systems	9
<i>Matveyev O., Nesterenko H.</i> On local invariant affine connected spaces	19
<i>Martynyuk A., Matveyev O.</i> The category equivalence of models and universal algebras as the basis of the construction of the algorithms of processing of intelligent relational databases	28
<i>Zaharov M., Semenchin E.</i> Constructing the approximate solutions of the two-dimensional boundary problems with the nonlinear equation of diffusion in the isotropic environment	35
<i>Evstigneev N.</i> About one averaging method of the equations of a compressible and incompressible liquid	47
<i>Evstigneev N.</i> On the lattice Boltzmann method stabilization for turbulent flow regimes with extremely high Reynolds numbers	53
.....	
<i>Gusev A.</i> The detection polynomial algorithm decision <i>NP</i> tasks MDX prediction in mode of parallel computing	63

PHYSICS

<i>Bogdanova S., Gladkov S.</i> on the calculation of longitudinal magnetic susceptibility in fractal ferromagnet dielectric	76
<i>Bogacheva E., Dolgov A., Shishkov A.</i> Trinium planigrafy: a technique, area of application, some results	81
<i>Maksimochkin G., Pasechnik S., Kralj S.</i> Ultrasound study of phase transitions in liquid crystal emulsions	89
<i>Zaharchenko E.</i> Rectangular wave guide with two-componental periodically evanescent strengthening environment	101
<i>Petrov V., Belyaev V.</i> Liquid crystalline cyanoethyl esters	107

OUR AUTHORS	113
-------------	-----

УДК 514.76:512.54

Пространства аффинной связности с обобщенным алгебраическим свойством Муфанг / Нестеренко Е.Л. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №2. С.3-9.

В работе вводятся в рассмотрение двусторонние многообразия аффинной связности, дается их алгебраическое описание, выводятся некоторые необходимые дифференциально – геометрические тождества, имеющие место в данном классе пространств. Рассмотрены двусторонние пространства нулевой кривизны, доказывается, что лупы Муфанг и только они являются геодезическими лупами гладких двусторонних пространств нулевой кривизны. Получено точное алгебраическое описание широкого класса пространств аффинной связности, представляющих определенный научный интерес.

Ил. 7.

УДК 512:515.1:007

Топологические реляционные системы / Матвеев О.А. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №2. С.9-18.

В статье вводятся в рассмотрение топологические реляционные системы для моделирования различных предметных областей. Проведена формализация процедуры определения типа объектов в пространстве признаков предметной области.

Библиогр.12.

УДК 514.76:512.54

О локально инвариантных пространствах аффинной связности / Матвеев О.А., Нестеренко Е.Л. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №2. С.19-28.

В настоящей статье выводятся необходимые и достаточные алгебраические условия, описывающие широкий класс локально инвариантных многообразий аффинной связности. Отдельно рассмотрены случаи локальной инвариантности аффинно – связного пространства относительно редуکتивного и симметрического пространств.

Библиогр.27.

УДК 512.57:510.67

Эквивалентность категорий моделей и универсальных алгебр, как основа построения алгоритмов обработки реляционных баз знаний / Мартынюк А.Н., Матвеев О.А. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №2. С.28-35.

Доказывается эквивалентность категорий моделей и универсальных алгебр. Конструкция может быть использована для построения алгоритмов обработки реляционных баз знаний.

Библиогр.10.

УДК 517.947

Приближенное решение плоских краевых задач с нелинейным уравнением диффузии в изотропной среде / Захаров М.Ю., Семенчин Е.А. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №2. С.35-46.

В статье рассматриваются первая и вторая двумерные краевые задачи для уравнения диффузии в изотропной среде с зависящим от концентрации коэффициентом (диффузии). Численное решение таких задач сопряжено с большими трудностями. Используется методика, основанная на дискретизации исходных задач по времени и итерационном процессе построения для каждого рассматриваемого момента времени приближенных решений вспомогательных линейных задач. Приближенные решения вспомогательных задач строятся методом базисных потенциалов. С помощью данной методики построены приближенные решения рассматриваемых нелинейных задач. Приведен общий вид этих приближенных решений. На конкретных примерах показана сходимость приближенных решений задач к точным.

Ил.7. Библиогр.11.

УДК 519.635, 532.5.032

Об одном способе осреднения уравнений сжимаемой и несжимаемой жидкости / Евстигнеев Н.М. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №2. С.47-52.

В данной статье предложена схема осреднения уравнений движения вязкой сжимаемой и несжимаемой Ньютонической жидкости, позволяющая получить замкнутую систему уравнений для осредненных и флюктуационных составляющих термогидродинамических функций не связанных с размерами сетки, в отличие от LES. Предложен способ численного интегрирования полученных систем уравнений. Работа поддержана Российским Фондом Фундаментальных Исследований (гранты 08-07-00074а и 09-07-00078а).

Библиогр.8.

УДК 519:532

О стабилизации сеточного метода Больцмана для высоких чисел Рейнольдса при моделировании турбулентного режима течения жидкости / Евстигнеев Н.М. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №2. С.53-62.

В работе рассматривается стабилизация сеточного метода Больцмана при стремлении числа Рейнольдса к бесконечности (исчезающе малой вязкости). Анализируется поведение алгоритма и устойчивость различных шагов метода расщепления для алгоритма stream and collide. Вводится локальное ограничение на отклонение энтропии функции распределения частицы от равновесного состояния. Ограничитель аналогичен применению метода TVD в классической вычислительной гидродинамике. Проводится анализ получаемых решений на модельной двумерной геометрии класса D2Q9. Работа поддержана Российским Фондом Фундаментальных Исследований (гранты 08-07-00074а и 09-07-00078а).

Библиогр.11.

УДК 510.53:519.712.2:338.27

Обнаружение полиномиального алгоритма решения NP задачи многомерного прогнозирования в режиме параллельных вычислений / Гусев А.Н. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №2. С.63-75.

В работе ставится и решается задача прогнозирования в многомерном экономическом пространстве с применением множества аналитических математических моделей, построенных по многомерным статистическим данным. Набор моделей образует базу знаний, позволяющую генерировать полный комбинаторный набор сценариев прогнозирования. Каждый сценарий реализует итеративную процедуру определения очередной устойчивой точки прогноза. Даны оценки количества сценариев в зависимости от размерности экономического пространства. Теоретически показано, что многомерное прогнозирование представляет собой NP задачу с недетерминированным алгоритмом. Экспериментально показано, что время последовательного решения задачи прогнозирования экспоненциально зависит от размерности пространства. Обнаружено, что параллельное решение задачи прогнозирования выполняется за полиномиальное время, что подтверждено экспериментально на примере прогнозирования численности населения Германии, ВВП и других измерений 6-мерного экономического пространства её статистических данных.

Ил.9. Табл.5. Библиогр.8.

УДК 537.6

О вычислении продольной магнитной восприимчивости фрактальных ферродиелектриков / Богданова С.Б., Гладков С.О. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №2. С.76-80.

Получено общее выражение для продольной компоненты тензора магнитной восприимчивости фрактального легкоосного ферромагнетика с размерностью $d_F = 3 - \varepsilon$, где $\varepsilon > 0$.

Библиогр.9.

УДК 577.32(21)

Третьевая планиграфия: методика, области применения, некоторые результаты / Богачева Е.Н., Долгов А.А., Шишков А.В. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №2. С.81-89.

Излагается методика третьевой планиграфии (ТП). Проведено сравнение с другими методами. Разработан комплексный подход к исследованию пространственной структуры белков, основанный на совместном использовании экспериментального метода ТП и пакета программ для интерпретации опытных данных и предсказания структуры белков. Представлены некоторые результаты применения этого подхода к решению широкого круга задач, таких как построение трехмерной структуры биомолекулы и сравнение ее с кристаллической (если она известна), определение ориентации молекулы и степени ее погруженности, когда она находится на границе раздела фаз, и других. Работа поддержана РФФИ (09-03-00469).

Библиогр.17.

УДК 534.2:535.36

Ультразвуковые исследования фазовых переходов в эмульсиях жидких кристаллов / Максимочкин Г.И., Пасечник С.В., Краль С. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №2. С.89-101.

Исследованы скорость распространения и коэффициент поглощения ультразвука на частоте 2,7 МГц в эмульсиях жидкого кристалла (ЖК) Н96 в воде с размерами капель в диапазоне 200...5000 нм (образец I) и 200...1500 нм (образец II). Показана возможность изучения на основе анализа акустических параметров ЖК эмульсий характеристик фазового перехода нематик – изотропная жидкость и критической динамики ЖК в каплях микронных и субмикронных размеров.

Ил.7. Библиогр.24.

УДК 537.8

Прямоугольный волновод с двухкомпонентной периодически запердельной усиливающей средой / Захарченко Е.П. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №2. С.101-106.

Многослойные периодические структуры широко применяются в устройствах различных частотных диапазонов и сравнительно подробно исследованы в области прозрачности сред. В этой работе получены дисперсионные характеристики двухкомпонентной структуры с запердельным слоем усиливающей среды. Установлено, что введение среды с усилением позволяет получить дисперсионные характеристики с постоянным по частоте коэффициентом усиления.

Ил.3. Библиогр.4.

УДК 532.783

Жидкокристаллические цианоэтиловые эфиры / Петров В.Ф., Беяев В.В. // Вестн. Моск. гос. обл. ун-та. Сер. Физика-математика, 2010, №2. С.107-112.

Представлены мезоморфные и физико-химические свойства новых жидкокристаллических цианоэтиловых эфиров. Обсуждена связь полученных результатов с молекулярной структурой исследуемых соединений.

Табл.1. Библиогр.23.

ПРАВИЛА

подготовки рукописей, представленных для опубликования в журнале
«Вестник Московского государственного областного университета»
Сер. Физика - математика»

Для публикации научных работ в выпусках серии «Вестник МГОУ» принимаются статьи на русском языке. Публикуются научные материалы преимущественно докторантов, аспирантов, соискателей, преподавателей ВУЗов, докторов и кандидатов наук.

Требования к оформлению статей. Статья должна быть представлена:

- в текстовом варианте (текст статьи должен быть подписан всеми авторами);
- в виде документа MS Word (с расширением doc);
- в виде файла в формате rtf;

Файл должен содержать построчно:

На русском языке	УДК (в верхнем левом углу первого листа рукописи) НАЗВАНИЕ СТАТЬИ – прописными буквами Фамилия, имя, отчество (полностью) Полное наименование организации (в скобках – сокращенное), почтовый адрес Должность (другие сведения, например, E-mail, телефон) Аннотация (1 абзац до 400 символов) под заголовком «АННОТАЦИЯ» Ключевые слова
На английском языке	НАЗВАНИЕ СТАТЬИ – прописными буквами Фамилия (полностью), инициалы Полное наименование организации, город Аннотация (1 абзац до 400 символов) под заголовком «Abstract» Ключевые слова (Key words)
На русском языке	Объем статьи ограничен теми уровнями: а) 12 страниц с числом иллюстраций до пяти (к этим статьям предъявляются повышенные требования); б) 6 страниц с числом иллюстраций до трех (содержатся основные результаты без излишних деталей выводов и доказательств); в) 4 страницы с числом иллюстраций до двух (выходят в разделе краткие сообщения вне очереди). Список использованной литературы под заголовком «ЛИТЕРАТУРА»

Формат страницы – А4, книжная ориентация. Поля – 2,5 см. Шрифт Times New Roman Cyrillic, цвет шрифта черный, размер 12 пикселей, междустрочный интервал – полуторный.

Запрещены специфические действия над текстом: уплотнение интервалов, использование цветowych заливок, «красные строки», центрирование, табуляция, отступы, переносы в словах (делаемые автором), сноски (лучше их оформлять в виде примечаний, замечаний и т.п.). Не допускаются сокращения слов, имен, названий, за исключением общепринятых (и оговоренных).

Формулы нумеруются (справа) только те, на которые в тексте имеются ссылки.

Рисунки и таблицы допускаются в том случае, если описать процесс в текстовой форме невозможно. В этом случае каждый из объектов не должен превышать указанные размеры страницы, а шрифт в нем – 12 пикселей. Возможно использование только вертикальных таблиц и рисунков. Запрещены цветные заливки, применение «фонов».

Рисунки, схемы, графики выполняются на отдельных листах в формате, обеспечивающем ясность передачи деталей. Места расположения иллюстраций в тексте должны быть указаны простым карандашом на полях. На обороте иллюстрации должны быть написаны фамилия автора и название статьи. Текст к иллюстрациям, а также таблицы следует поместить на отдельных страницах. Все рисунки, схемы, графики, таблицы должны иметь названия.

Все формулы должны быть созданы с использованием компонента Microsoft Equation. Размер шрифта также 12 пикселей. Формула создается однократным запуском компонента Microsoft Equation. Запрещается создавать составные формулы! Небольшие строчные фрагменты типа ΔU_{ij} или $C^{(m)} = (c_{1m}, c_{1m}, \dots)^T$ следует набирать обычным способом в латинице, используя средства панели инструментов: изменение шрифта на курсив, написание верхних и нижних индексов, а также вставку символов. При этом следует обратить внимание на написание цифр, скобок, операторов и наименований функций (Δ , \sin , \cos , ...) прямым шрифтом. Хорошее представление об оформлении математических текстов дает чтение научных журналов Российской академии наук физико-математического направления, классических учебников по физике и математике для высших учебных заведений.

Абзацы должны быть отделены друг от друга пустой строкой (дополнительным «Enter»).

Список литературы должен содержать библиографические сведения о всех публикациях, упоминаемых в статье, и не должен содержать указаний на работы, на которые в тексте нет ссылок. Располагать публикации в списке следует в порядке упоминания о них в статье. Список литературы приводится на отдельном листе с обязательным указанием следующих данных: для книг (монография, сборник и т.д.) - фамилия и инициалы автора, название книги, издательство, место издания (город), год издания; для журнальных статей – фамилия и инициалы автора, название статьи, название журнала, год издания, том, номер, выпуск, страницы (первая и последняя).

Ссылки на неопубликованные работы не допускаются.

Редакционная коллегия оставляет за собой право на редактирование статей, хотя с точки зрения научного содержания авторский вариант сохраняется. Статьи, не соответствующие указанным требованиям, решением редакционной коллегии серии не публикуются и не возвращаются (почтовой пересылкой).

В случае принятия статьи, условия опубликования оговариваются с ответственным редактором.

Ответственный редактор серии «Физика-математика» декан физико-математического факультета, доктор технических наук, профессор Бугримов Анатолий Львович.

Адрес редколлегии серии «Физика-математика» «Вестника МГОУ»: 105005, г.Москва, ул. Радио, д.10-а, комн. 36. Тел. (495) 261-09-48