



**ОПОВІДІ**  
НАЦІОНАЛЬНОЇ  
АКАДЕМІЇ НАУК  
УКРАЇНИ

5 • 2014

---

Науково-теоретичний журнал Президії Національної академії наук України

Заснований у 1939 р.

Виходить щомісяця

---

**РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ ЖУРНАЛУ**

А. Г. НАУМОВЕЦЬ (головний редактор), П. І. Андон, С. А. Андронаті, Л. А. Булавін, А. Ф. Булат, Г. М. Гавричкова (заст. головного редактора), В. М. Геєць (заст. головного редактора з наук. питань), В. В. Гончарук, В. Т. Грінченко, Я. М. Григоренко, Д. М. Гродзинський, В. М. Єремєєв, В. О. Іванов, І. М. Коваленко, С. В. Комісаренко, В. П. Кухар, В. М. Локтев, О. О. Мойбенко, В. В. Моргун, І. М. Неклюдов, В. Д. Походенко, І. К. Походня, А. М. Самойленко, В. П. Семиноженко, І. В. Сергієнко, В. І. Старостенко, Б. С. Стогній, В. М. Шестопапов, Я. С. Яцків

© Національна академія наук України, 2014

Редактори розділів

**Л. М. Литвинова, Л. І. Пузанкова, Т. І. Хоменко**

Оформлення художника В. Г. Самсонова

Комп'ютерна верстка В. І. Бойко, Г. В. Попович

Видавничий дім «Академперіодика»

Свідоцтво про внесення до Держреєстру суб'єкта видавничої справи  
серії ДК № 544 від 27.07.2001

01004, Київ, вул. Терещенківська, 4

---

Підписано до друку 08.05.2014. Формат 84×108/16. Ум. друк. арк. 17,64. Обл.-вид. арк. 16.  
Тираж 220 прим. Зам. 3901. Ціна 30 грн.

---

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

# Зміст

---

## Математика

<i>Болотов Д. В.</i> Топология слоений неотрицательной кривизны на пятимерных многообразиях II .....	7
<i>Герасименко В. І., Федчун Ю. Ю.</i> Кінетичні рівняння активної м'якої речовини .....	11
<i>Ефимушкин А. С., Рязанов В. И.</i> О регулярных решениях задачи Римана–Гильберта для уравнений Бельтрами .....	19
<i>Іванов О. В., Орловський І. В.</i> Асимптотичні властивості оцінки параметрів лінійної регресії у випадку слабо залежних регресорів .....	24
<i>Курдаченко Л. А., Субботін І. Я., Чупордя В. А.</i> Про структуру модулів над узагальнено розв'язними групами .....	29

## Інформатика та кібернетика

<i>Грицик В. В., Бондарук А. Б., Грицик В. В., Кравець І. І., Опотьяк Ю. В., Цмоць І. Г.</i> Інформаційна технологія програмно-керованих растрів введення зображень у системах комп'ютерного зору .....	34
<i>Сирик С. В., Сальников Н. Н.</i> О применении сосредоточения в методе конечных элементов Петрова–Галеркина при решении задач конвекции–диффузии .....	39
<i>Шевченко А. И., Миненко А. С.</i> Осесимметричное потенциально-вихревое течение со свободной границей .....	45

## Механіка

<i>Каминский А. А., Дудик М. В., Кипнис Л. А.</i> Влияние области деструкции материала вблизи вершины межфазной трещины на условия ее страгивания .....	50
<i>Кубенко В. Д.</i> Нестационарная нагрузка на поверхности упругого полупространства ....	58
<i>Мартынюк А. А.</i> Об устойчивости траекторий множества разностных уравнений .....	65

## Фізика

<i>Баранський П. І., Гайдар Г. П.</i> Вплив високотемпературного відпалу на параметри анізотропії рухливості і анізотропії термо-ЕРС захоплення електронів фононами в $n$ -Si .....	70
<i>Булавін Л. А., Гаврюшенко Д. А., Коробко О. В., Сисоев В. М., Черевко К. В.</i> Дифузійні потоки та продукування ентропії в плоскопаралельній порі у випадку ідеального розчину .....	76

## Матеріалознавство

<i>Ніколюк П. К., Ющенко А. В., Стасенко В. А., Ніколайчук В. Я.</i> Дегібридизація в сполуках $RAl_2Si_2$ .....	83
--	----

## Науки про Землю

<i>Дугін С. С.</i> Оцінка і вибір полігонів для наземної завірки інформації космічного геомоніторингу .....	87
<i>Ковальчук Л. А.</i> Моделирование динамики статистических распределений температуры воздуха посредством процесса Орнштейна–Уленбека и уравнения Фоккера–Планка .....	95
<i>Пустовитенко Б. Г., Мерзсей Е. А.</i> К прогнозу ожидаемых сейсмических воздействий от сильных землетрясений Крыма .....	102

<i>Шаталов Н. Н.</i> Крупная Новоигнатьевская дайка андезитовых порфиритов — как индикатор разломно-блоковой тектоники и глубинного строения зоны сочленения Донбасса с Приазовьем .....	110
--	-----

## Хімія

<i>Бичков К. Л., Терещенко К. В., Слободяник М. С.</i> Кристалотворення $\text{BiVO}_4$ з розплавів системи $\text{K}-\text{Bi}-\text{V}-\text{Mo}-\text{O}$ .....	116
<i>Демченко І. Б., Кісельова Т. О., Наражсайко Л. Ф., Галатенко Н. А.</i> Розробка та дослідження біологічно активного полімерного матеріалу з іммобілізованим вінкристином ....	121
<i>Жолобок О. Ю., Тарнавчик І. Т., Воронов А. С., Будішевська О. Г., Когут А. М., Воронов С. А.</i> Особливості формування гідрогелів на основі хітозану та поліетиленглікольдисукцинатів шляхом термообробки .....	128

## Біологія

<i>Кузнецова Г. М., Линчак О. В., Яблонська С. В., Бахуринська О. М., Данилов М. О., Бичко А. В., Рибальченко В. К.</i> Властивості похідних піролу як потенційних протипухлинних сполук нового покоління .....	138
<i>Тинкевич Ю. О., Волков Р. А.</i> Новий структурний клас 5S рДНК <i>Rosa wichurana</i> Среп. .	143

## Біохімія

<i>Урвант Л. П., Макогоненко Є. М., Позняк Т. А., Пидюра М. О., Колеснікова І. М., Цап П. Ю., Березницький Г. К., Луговської Е. В., Комісаренко С. В.</i> Зв'язування моНАТ П-5с з А $\alpha$ 20–78 ділянкою фібриногену інгібує експозицію неоантигенної детермінанти в В $\beta$ 126–135 сайті молекули .....	149
---	-----

## Медицина

<i>Кальничи В. В., Швець А. В.</i> Проблема надежности: новый подход к оценке качества операторской деятельности .....	157
<i>Пушкарьов В. М., Ковзун О. І., Пушкарьов В. В., Тронько М. Д.</i> Дія паклітакселу та інгібітора ядерного фактора NF- $\kappa$ B на пухлини раку щитоподібної залози <i>in vivo</i> ....	164

# Contents

---

## Mathematics

- Bolotov D. V.* Topology of nonnegative curvature foliations on five-dimensional manifold II .. 7
- Gerasimenko V. I., Fedchun Yu. Yu.* Kinetic equations of soft active matter ..... 11
- Yefimushkin A. S., Ryazanov V. I.* On the regular solutions of the Riemann–Hilbert problem for the Betrami equations ..... 19
- Ivanov A. V., Orlovsky I. V.* Asymptotic properties of the estimator of linear regression parameters in the case of weakly dependent regressors ..... 24
- Kurdachenko L. A., Subbotin I. Ya., Chupordya V. A.* On the structure of some modules over generalized soluble groups ..... 29

## Information Science and Cybernetics

- Grytsyk V. V., Bondaruk A. B., Grytsyk V. V., Kravets I. I., Opotyak Yu. V., Tsmots I. G.* Information technology of software-controlled rasters for the image acquiring for computer vision systems ..... 34
- Siryk S. V., Salnikov N. N.* On the application of mass lumping in the Petrov–Galerkin finite element method for convection-diffusion problems ..... 39
- Shevchenko A. I., Minenko A. S.* Axially symmetric potentially rotational flow with free boundary ..... 45

## Mechanics

- Kaminsky A. A., Dudyk M. V., Kipnis L. A.* Influence of the process zone at the tip of an interfacial crack on the condition of its advancement ..... 50
- Kubenko V. D.* Nonstationary loading at the elastic half-space surface ..... 58
- Martynyuk A. A.* On the stability of trajectories of a set of difference equations ..... 65

## Physics

- Baranskii P. I., Gaidar G. P.* Influence of the high-temperature annealing on the anisotropy parameters of mobility and the anisotropy of the thermoelectromotive-drag of electrons by phonons in n-Si ..... 70
- Bulavin L. A., Gavryushenko D. A., Korobko O. V., Sysoev V. M., Cherevko K. V.* Diffusive flows and entropy production in a plane-parallel layer for the ideal solution approximation .. 76

## Materials science

- Nikolyuk P. K., Yushchenko A. V., Stasenko V. A., Nikolaichuk V. Ya.* Dehybridization in  $RAl_2Si_2$  compounds ..... 83

## Geosciences

- Dugin S. S.* Evaluation and choice of polygons for the ground-based certification of the information of space geomonitoring ..... 87
- Kovalchuk L. A.* Dynamic simulation of statistical distributions of the air temperature by using the Ornstein–Uhlenbeck process and the Fokker–Planck equation ..... 95
- Pustovitenko B. G., Merjey E. A.* On the prediction of expected seismic impacts from strong earthquakes of the Crimea ..... 102

*Shatalov N. N.* The large Novoignatievien dyke of andesite porphyrites as an indicator for the fault-block tectonics and the deep structure for the Donbas and Near-Azovian junction zone 110

## Chemistry

*Bychkov K. L., Terebilenko K. V., Slobodyanik N. S.* Crystal growth of  $\text{BiVO}_4$  from the K–Bi–V–Mo–O molten system ..... 116

*Demchenko I. B., Kiseleva T. A., Narazhajko L.Ph., Galatenko N. A.* Development and researches of a biological active polymeric material with immobilized Vincristine ..... 121

*Zholobko O. Yu., Tarnavchik I. T., Voronov A. S., Budishevska O. G., Kohut A. M., Voronov S. A.* Peculiarities of the development of hydrogels based on chitosan and poly(ethylene glycol) disuccinate at elevated temperature ..... 128

## Biology

*Kuznietsova H. M., Lynchak O. V., Yablonska S. V., Bachurynska O. M., Danylov M. O., Bychko A. V., Rybalchenko V. K.* Properties of pyrrol derivatives as potential anticancer compounds of a new generation ..... 138

*Tynkevich Yu. O., Volkov R. A.* Novel structural class of 5S rDNA of *Rosa wichurana* Crep. . 143

## Biochemistry

*Urvant L. P., Makogonenko E. M., Pozniak T. A., Pydiura N. A., Kolesnikova I. N., Tsap P. Y., Bereznitzkiy G. K., Lugovskoy E. V., Komisarenko S. V.* The binding of mAb II-5c with A $\alpha$ 20-78 fragment of fibrinogen inhibits a neoantigenic determinant exposure within B $\beta$ 126-135 site of a molecule ..... 149

## Medicine

*Kalnysh V. V., Shvets A. V.* The problem of reliability: a new approach to the estimation of operator's activity quality ..... 157

*Pushkarev V. M., Kovzun O. I., Pushkarev V. V., Tronko M. D.* Effects of paclitaxel and nuclear factor NF- $\kappa$ B inhibitor in thyroid cancer tumors *in vivo* ..... 164



УДК 515.168.3

Д. В. Болотов

## Топология слоений неотрицательной кривизны на пятимерных многообразиях II

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины Украины А. А. Борисенко)

Приведено полное доказательство того, что многообразие, гомеоморфное пятимерной сфере, не допускает слоения коразмерности один неотрицательной кривизны.

Напомним основной результат работы [1].

**Теорема А.** Пусть  $M$  — замкнутое пятимерное риманово многообразие, гомеоморфное пятимерной сфере. Тогда  $M$  не допускает  $S^2$ -слоения коразмерности один неотрицательной секционной кривизны.

В [1] был дан набросок доказательства данной теоремы. Доказательство существенно опиралось на теорему 1, приведенную ниже, и два следствия из нее, которые являются верными лишь в частном случае, описанном ниже. В данной работе мы покажем, что этого частного случая достаточно для доказательства теоремы А.

Напомним, что  $M$  можно представить в виде объединения  $M = A \cup B$ , где  $A \cap B$  — объединение блоков, имеющих две компоненты связности границы, если такие блоки существуют, и  $A \cap B$  — единственный компактный слой в противном случае. Тогда  $C = M \setminus \text{int } B$  и  $D = M \setminus \text{int } A$  — блоки с одной компонентой связности границы.

**Теорема 1** [2]. Если для некоторой группы  $G$  следующая диаграмма коммутативна:

$$\begin{array}{ccc} & \pi_1(A) & \\ \phi_1 \nearrow & & \searrow \rho_1 \\ \pi_1(A \cap B) & \xrightarrow{\rho_3} & G \\ \phi_2 \searrow & & \nearrow \rho_2 \\ & \pi_1(B) & \end{array}$$

то однозначно определен гомоморфизм  $\sigma: \pi_1(M) \rightarrow G$  такой, что  $\rho_i = \sigma \circ \psi_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , где  $\phi_1, \phi_2$ , а также  $\psi_1: \pi_1(A) \rightarrow \pi_1(M)$ ,  $\psi_2: \pi_1(B) \rightarrow \pi_1(M)$ ,  $\psi_3: \pi_1(A \cap B) \rightarrow \pi_1(M)$  — гомоморфизмы, индуцированные включениями.

*Замечание 1.* Линейно связные подмножества  $A$ ,  $B$  и  $A \cap B$  в цитируемой теореме должны быть открытыми и линейно связными. Но это требование можно ослабить, потребовав, чтобы существовали открытые подмножества  $U_A, U_B$  и  $U_{A \cap B}$ , содержащие  $A, B$  и  $A \cap B$  соответственно, для которых множества  $A, B$  и  $A \cap B$  являются деформационными ретрактами. В нашем случае блоки  $A, B$  и  $A \cap B$  удовлетворяют этому требованию. Достаточно к границам блоков  $A, B$  и  $A \cap B$  добавить маленькие открытые воротники.

*Замечание 2.* В следствиях 1 и 2 теоремы 1, приведенных в [1], предполагается, что образы гомоморфизмов включения  $\text{Im } \phi_1$  и  $\text{Im } \phi_2$  есть нормальные подгруппы в  $\pi_1(A)$  и  $\pi_1(B)$  соответственно. Без этого предположения следствия неверны. Примером может служить разбиение сферы  $S^3$  заузленным тором.

Приведем эти следствия вместе с доказательствами.

**Следствие 1.** *Если хотя бы один из гомоморфизмов  $\phi_i$  не сюръективен и его образ является нормальной подгруппой, то  $\pi_1(M)$  нетривиальна.*

**Доказательство.** Предположим, что  $\phi_1$  не сюръективен. Тогда положим  $G = \pi_1(A)/\text{Im } \phi_1$  и  $\rho_1: \pi_1(A) \rightarrow G$  — гомоморфизм факторизации. Положим  $\rho_2 = \rho_3 = 0$ . Так как  $\rho_1 = \sigma \circ \psi_1$ , то  $\sigma$  нетривиален, а значит,  $\pi_1(M)$  нетривиальна.

**Следствие 2.**  *$\text{Im } \phi_1$  и  $\text{Im } \phi_2$  есть нормальные подгруппы в  $\pi_1(A)$  и  $\pi_1(B)$  соответственно. Пусть  $N$  — группа, порожденная  $\text{Ker } \phi_1 \cup \text{Ker } \phi_2$ . Если  $N \neq \pi_1(A \cap B)$ , то  $\pi_1(M)$  нетривиальна.*

**Доказательство.** Предположим  $\pi_1(M)$  тривиальна. Тогда  $\phi_1$  и  $\phi_2$  сюръективны по предыдущему следствию. Положим  $G = \pi_1(A \cap B)/N$ , а  $\rho_i$  — отображения факторизации. Тогда имеем  $\pi_1(A) \cong \pi_1(A \cap B)/\text{Ker } \phi_1$ ,  $\pi_1(B) \cong \pi_1(A \cap B)/\text{Ker } \phi_2$ ,  $G \cong \pi_1(A)/(N/\text{Ker } \phi_1) \cong \pi_1(B)/(N/\text{Ker } \phi_2)$ . Из теоремы 1 теперь следует, что  $\psi_i$  нетривиальны, а значит, группа  $\pi_1(M)$  нетривиальна.

Напомним основной результат работы [3] (см. также [4]).

**Теорема 2.** *Пусть  $\mathcal{F}$  трансверсально ориентируемое слоение коразмерности один отрицательной кривизны Риччи на замкнутом ориентируемом римановом многообразии  $M$ . Тогда  $\mathcal{F}$  является слоением почти без голономии и выполнена одна из следующих возможностей:*

1. *Все слои всюду плотны и  $M$  является расслоением над  $S^1$ .*

2.  *$\mathcal{F}$  содержит компактный слой и  $M$  можно разбить конечным числом компактных слоев на блоки <sup>1</sup> одного из следующих типов:*

A) *исключительный блок:  $V$  гомеоморфен  $K \times I$ , где  $K$  является компактным слоем слоения и слой  $K \times 0$  является предельным для множества компактных слоев;*

B) *плотный блок: все внутренние слои диффеоморфны типичному слою  $L$  и плотны в  $V$ ;*

C) *собственный блок: все внутренние слои диффеоморфны типичному некомпактному слою  $L$  и являются вложенными подмногообразиями в  $V$ . В этом случае  $\text{Int } V$  является расслоением над  $S^1$  со слоем  $L$ .*

<sup>1</sup>Блоком мы называем компактное слоеное многообразие с границей, состоящей из компактных слоев.



Если  $B$  — неисключительный блок, то  $\widetilde{\text{int}} B \cong \widetilde{L} \times \mathbb{R}$ , а его фундаментальная группа описывается групповым расширением

$$1 \rightarrow \pi_1(L) \rightarrow \pi_1(B) \xrightarrow{\phi} \mathbb{Z}^k \rightarrow 0, \quad (1)$$

где  $L$  — типичный внутренний слой блока  $B$ . Более того,  $k \geq 1$  и  $k = 1$  тогда и только тогда, когда блок собственный. Если, более того,  $\mathcal{F}$  — слоение неотрицательной секционной кривизны, то граница каждого блока имеет максимум две компоненты связности.

В [1] нами анонсировано следующее утверждение, полное доказательство которого приведено в [4].

**Утверждение 1.** Если  $N$  является объединением конечного числа блоков, граница которых имеет две связные компоненты, то вложение  $i: K \rightarrow N$  граничного слоя является гомотопической эквивалентностью.

Докажем следующее утверждение.

**Утверждение 2.** Пусть  $B$  — блок, не содержащий внутри компактных слоев, и  $K \subset \subset \partial B$  — граничный компактный слой. Тогда образ гомоморфизма  $i_*: \pi_1(K) \rightarrow \pi_1(B)$ , индуцированного вложением  $i: K \rightarrow B$ , является подгруппой индекса  $\leq 2$ , в частности, группа  $i_*(\pi_1(K))$  нормальна в  $\pi_1(B)$ .

**Доказательство.** Так как фундаментальная группа любого слоя содержит конечнопорожденную свободную абелеву подгруппу конечного индекса (см. [5]), а группа  $\pi_1(B)$  имеет структуру расширения (1), то  $\pi_1(B)$  есть виртуально полициклическая группа, т. е. группа, содержащая полициклическую подгруппу конечного индекса. По теореме Мальцева [6], всякая подгруппа такой группы является пересечением подгрупп конечного индекса. В частности, отсюда следует, что всякая бесконечная подгруппа виртуально полициклической группы содержится в подгруппе конечного индекса, большего 1. Если  $\partial B$  имеет две компоненты связности, то по утверждению 1 индуцированный вложением гомоморфизм  $i_*: \pi_1(K) \rightarrow \pi_1(B)$  является изоморфизмом. Пусть  $\partial B$  имеет одну компоненту связности. Предположим, что гомоморфизм  $i_*: \pi_1(K) \rightarrow \pi_1(B)$  не является эпиморфизмом. Тогда  $i_*\pi_1(K)$  содержится в подгруппе  $G$  конечного индекса, большего 1. Покажем, что этот индекс равен 2. Нетрудно видеть, что число компонент границы конечнолистного накрытия, соответствующего подгруппе  $G \subset \pi_1(B)$ , должно быть больше 1, а значит, равно 2 по теореме 2. Так как вложение каждой компоненты границы накрытия в этом случае, как уже отмечалось, есть гомотопическая эквивалентность, то образ фундаментальной группы любой граничной компоненты, индуцированный накрытием, имеет один и тот же индекс, равный числу листов накрытия. Следовательно, ограничение отображения накрытия на любую связную компоненту границы является гомеоморфизмом, а образ гомоморфизма  $i_*: \pi_1(K) \rightarrow \pi_1(B)$  должен иметь индекс 2, что и требовалось доказать.

Теперь доказательство теоремы А, приведенное в [1], является полностью обоснованным. Единственное, что стоит пояснить, это возможность применения гомоморфизма спектральных последовательностей в доказательстве случая 5 теоремы А. Но это следует из гомологической простоты расслоения  $\xi: L \rightarrow \text{int } C \xrightarrow{p} S^1$ , которая, в свою очередь, следует из нетривиальности группы  $H^3(C; \mathbb{R})$  (см. [1], случай 4 доказательства теоремы А).

Автор выражает благодарность проф. А. А. Борисенко за внимание к работе и полезные замечания.

1. Болотов Д. В. Топология слоений неотрицательной кривизны на пятимерных многообразиях // Доп. НАН України. — 2012. — № 12. — С. 7–12.

2. Масси У., Столлингс Д. Алгебраическая топология. Введение. – Москва: Мир, 1977. – 344 с.
3. Болотов Д. В. О структуре слоений коразмерности один неотрицательной кривизны // Тр. конф. “Актуальные проблемы современной математики, механики и информатики” ХНУ им. В. Н. Каразина. – Харьков: Апостроф, 2011. – С. 324–331.
4. Болотов Д. В. Топология слоений коразмерности 1 неотрицательной кривизны // Мат. сб. – 2013. – **204**, № 5. – С. 3–24.
5. Cheeger J., Gromoll D. On structure of complete manifolds of nonnegative curvature // Ann. Math. – 1972. – **96**. – P. 413–443.
6. Мальцев А. И. О гомоморфизмах на конечные группы // Уч. зап. Иванова. пед. ин-та. – 1958. – **18**. – P. 49–60.

Фізико-технічний інститут низьких температур  
НАН України ім. Б. І. Веркина, Харків

Поступило в редакцію 22.10.2013

**Д. В. Болотов**

### **Топологія шарувань невід’ємної кривини на п’ятивимірних многовидах II**

*Наведено повне доведення того, що многовид, гомеоморфний п’ятивимірній сфері, не допускає шарування ковимірності один невід’ємної кривини.*

**D. V. Bolotov**

### **Topology of nonnegative curvature foliations on five-dimensional manifolds II**

*We give a complete proof of that a closed manifold homeomorphic to a five-dimensional sphere does not admit a foliation of nonnegative curvature with codimension one.*

В. І. Герасименко, Ю. Ю. Федчун

**Кінетичні рівняння активної м'якої речовини***(Представлено членом-кореспондентом НАН України М. Л. Горбачуком)*

*Побудовано немарковське узагальнення кінетичного рівняння для системи взаємодіючих стохастичних марковських процесів, якими моделюється еволюція активної м'якої конденсованої речовини. Для таких систем обґрунтовано кінетичне рівняння в скейлінговій границі самоузгодженого поля і встановлено властивість поширення початкового хаосу активної м'якої речовини.*

Одна з актуальних проблем сучасної математичної фізики і математичної біології полягає в строгому обґрунтуванні нелінійних кінетичних рівнянь для активної м'якої конденсованої речовини [1, 2], зокрема таких систем, як популяції клітин та бактерій, розчини клітин, наприклад крові, і т. п. В сучасних працях з теорії цих систем в основу опису покладено апріорі сформульовані еволюційні рівняння типу рівнянь суцільного середовища [1] або кінетичні рівняння [2, 3].

Відкритою залишається проблема математичного опису еволюції активної м'якої конденсованої речовини на мікроскопічному рівні [1]. В роботі [4] для моделювання колективної поведінки таких систем запропонована динамічна система багатьох взаємодіючих стохастичних процесів марковського типу. Така мікроскопічна модель динаміки дає можливість описати характерні властивості активної м'якої речовини, які відрізняються від статистичної поведінки звичайної речовини, що складається із взаємодіючих частинок, які рухаються за інерцією.

Як зазначено в роботі [5], еволюцію активної м'якої конденсованої речовини на мікроскопічному рівні природно описувати в термінах еволюції маргінальних спостережуваних. З цією метою в роботі [5] була побудована скейлінгова асимптотика (границя самоузгодженого поля) розв'язку задачі Коші для ієрархії еволюційних рівнянь для маргінальних спостережуваних і в такому наближенні встановлено зв'язок з описом еволюції в термінах кінетичних рівнянь.

Оскільки ряд типових нерівноважних властивостей активної м'якої конденсованої речовини обумовлений ефектами пам'яті еволюційних процесів у таких системах, метою роботи є обґрунтування кінетичного рівняння немарковського типу на основі ієрархії еволюційних рівнянь для маргінальних спостережуваних величин.

Розглянемо систему не фіксованої, але скінченної середньої кількості частинок (складових)  $N$  різних субпопуляцій, з яких складається активна речовина. Кожна  $i$ -та частинка характеризується змінними  $\mathbf{u}_i = (j_i, u_i) \in \mathcal{J} \times \mathcal{U}$ , де  $j_i \in \mathcal{J} \equiv (1, \dots, N)$  — номер субпопуляції частинки і  $u_i \in \mathcal{U} \subset \mathbb{R}^d$  — величини, якими описується її мікроскопічний стан [4].

Динаміка частинок, з яких складається активна речовина, описується півгрупою  $e^{t\Lambda} = \oplus_{n=0}^{\infty} e^{t\Lambda_n}$  марковських стрибкоподібних процесів, визначеною на просторі  $C_\gamma$  послідовностей  $b = (b_0, b_1, \dots, b_n, \dots)$  вимірних обмежених функцій  $b_n(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n)$ , які є симетричними відносно перестановки аргументів  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$ , з нормою  $\|b\|_{C_\gamma} = \max_{n \geq 0} \frac{\gamma^n}{n!} \|b_n\|_{C_n}$ , де  $\gamma < 1$  —

параметр та  $\|b_n\|_{C_n} = \max_{j_1, \dots, j_n} \max_{u_1, \dots, u_n} |b_n(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n)|$ . Інфінітезимальний генератор  $\Lambda_n$  півгрупи  $e^{t\Lambda_n}$  визначено на підпросторі  $C_n \subset C_\gamma$

$$\begin{aligned} (\Lambda_n b_n)(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) &= \sum_{k=1}^N \varepsilon^{k-1} \sum_{i_1 \neq \dots \neq i_k=1}^n (\Lambda^{[k]}(i_1, \dots, i_k) b_n)(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) \doteq \\ &\doteq \sum_{k=1}^N \varepsilon^{k-1} \sum_{i_1 \neq \dots \neq i_k=1}^n a^{[k]}(\mathbf{u}_{i_1}, \dots, \mathbf{u}_{i_k}) \left( \int_{\mathcal{J} \times \mathcal{U}} A^{[k]}(\mathbf{v}; \mathbf{u}_{i_1}, \dots, \mathbf{u}_{i_k}) \times \right. \\ &\quad \left. \times b_n(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{i_1-1}, \mathbf{v}, \mathbf{u}_{i_1+1}, \dots, \mathbf{u}_n) d\mathbf{v} - b_n(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) \right), \end{aligned} \quad (1)$$

де  $\varepsilon > 0$  — скейлінговий параметр та  $\int_{(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^n} d\mathbf{u}_1 \cdots d\mathbf{u}_n \equiv \sum_{j_1 \in \mathcal{J}} \cdots \sum_{j_n \in \mathcal{J}} \int_{\mathcal{U}^n} du_1 \cdots du_n$ .

Функції  $a^{[k]}(\mathbf{u}_{i_1}, \dots, \mathbf{u}_{i_k})$ ,  $k \geq 1$ , характеризують взаємодію між активними частинками, зокрема, у випадку  $k = 1$  — взаємодію частинок з оточенням, і є вимірними позитивними обмеженими функціями, визначеними на  $(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^n$ , такими, що  $0 \leq a^{[k]}(\mathbf{u}_{i_1}, \dots, \mathbf{u}_{i_k}) \leq a_*^{[k]}$ , де  $a_*^{[k]}$  — деяка стала. Вимірні інтегровані позитивні функції  $A^{[k]}(\mathbf{v}; \mathbf{u}_{i_1}, \dots, \mathbf{u}_{i_k})$ ,  $k \geq 1$ , описують імовірність переходу  $i_1$ -ї активної частинки з мікроскопічного стану  $u_{i_1}$  в стан  $v$  в результаті взаємодії з активними частинками, які знаходяться в станах  $u_{i_2}, \dots, u_{i_k}$ . Функції  $A^{[k]}(\mathbf{v}; \mathbf{u}_{i_1}, \dots, \mathbf{u}_{i_k})$ ,  $k \geq 1$ , задовольняють такі умови:  $\int_{\mathcal{J} \times \mathcal{U}} A^{[k]}(\mathbf{v}; \mathbf{u}_{i_1}, \dots, \mathbf{u}_{i_k}) d\mathbf{v} = 1$ ,

$k \geq 1$ . У роботі [4] наведено приклади функцій  $a^{[k]}$  і  $A^{[k]}$ , які мають відповідну інтерпретацію для систем математичної біології. У випадку  $k = 1$  генератор (1) має таку структуру:  $\sum_{i_1=1}^n \Lambda_n^{[1]}(i_1)$ , і він описує еволюцію незваємодіючих складових (стохастичних процесів) системи. Випадок  $k \geq 2$  відповідає системі стохастичних процесів з  $k$ -арною взаємодією. Такий тип взаємодії є характерним для біологічних систем у порівнянні з системами багатьох частинок кінетичної теорії, наприклад газів атомів з парним потенціалом взаємодії.

У просторі  $C_n$  однопараметрична сім'я відображень  $e^{t\Lambda_n}$  є \*-слабо неперервною півгрупою операторів.

Послідовність маргінальних спостережуваних  $B(t) = (B_0, B_1(t, \mathbf{u}_1), \dots, B_s(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_s), \dots)$  у довільний момент часу  $t \geq 0$  визначається такими розкладами [6, 7]:

$$\begin{aligned} B_s(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_s) &= \sum_{n=0}^s \frac{1}{n!} \sum_{j_1 \neq \dots \neq j_n=1}^s \mathfrak{A}_{1+n}(t, \{Y \setminus Z\}, Z) \times \\ &\quad \times B_{s-n}^{0,\varepsilon}(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{j_1-1}, \mathbf{u}_{j_1+1}, \dots, \mathbf{u}_{j_n-1}, \mathbf{u}_{j_n+1}, \dots, \mathbf{u}_s), \quad s \geq 1, \end{aligned} \quad (2)$$

де  $B(0) = (B_0, B_1^{0,\varepsilon}(\mathbf{u}_1), \dots, B_s^{0,\varepsilon}(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_s), \dots)$  — послідовність початкових маргінальних спостережуваних. Твірний оператор  $\mathfrak{A}_{1+n}(t)$  розкладу (2) є кумулянтном  $(1+n)$ -го порядку півгруп операторів  $\{e^{t\Lambda_k}\}_{t \geq 0}$ ,  $k \geq 1$ , який визначається формулою [7]

$$\mathfrak{A}_{1+n}(t, \{Y \setminus Z\}, Z) \doteq \sum_{\mathbb{P}: (\{Y \setminus Z\}, Z) = \bigcup_i Z_i} (-1)^{|\mathbb{P}|-1} (|\mathbb{P}| - 1)! \prod_{Z_i \subset \mathbb{P}} e^{t\Lambda_{|\theta(Z_i)|}}, \quad (3)$$

де множини індексів позначено відповідними символами:  $Y \equiv (1, \dots, s)$ ,  $Z \equiv (j_1, \dots, j_n) \subset Y$ ; множина  $\{Y \setminus Z\}$  складається з одного елемента  $Y \setminus Z = (1, \dots, j_1 - 1, j_1 + 1, \dots, j_n - 1, j_n + 1, \dots, s)$ ; символ  $\sum_P$  — сума за всіма можливими розбиттями  $P$  множини  $(\{Y \setminus Z\}, Z)$  на  $|P|$  непорожніх підмножин  $Z_i \in (\{Y \setminus Z\}, Z)$ , які взаємно не перетинаються, та відображення  $\theta(\cdot)$  є оператором декластеризації елементів множини:  $\theta(\{Y \setminus Z\}, Z) = Y$ .

Найпростіші приклади маргінальних спостережуваних (2) зображуються такими розкладами:

$$B_1(t, \mathbf{u}_1) = \mathfrak{A}_1(t, 1)B_1^{0,\varepsilon}(\mathbf{u}_1),$$

$$B_2(t, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) = \mathfrak{A}_1(t, \{1, 2\})B_2^{0,\varepsilon}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) + \mathfrak{A}_2(t, 1, 2)(B_1^{0,\varepsilon}(\mathbf{u}_1) + B_1^{0,\varepsilon}(\mathbf{u}_2)),$$

де кумулянти першого і другого порядку (3) визначаються відповідно такими формулами:

$$\mathfrak{A}_1(t, \{1, 2\}) = e^{t\Lambda_2},$$

$$\mathfrak{A}_2(t, 1, 2) = e^{t\Lambda_2} - e^{t\Lambda^{[1]}(1)}e^{t\Lambda^{[1]}(2)}.$$

Зауважимо, що послідовність функцій (2) є непертурбативним розв'язком задачі Коші для рекурсивних еволюційних рівнянь (дуальної ієрархії рівнянь Боголюбова–Борна–Гріна–Кірквуда–Івона), сформульованих у роботі [5].

Нехай  $L^1(\mathcal{J} \times \mathcal{U})$  — простір інтегрованих функцій  $f_1(\mathbf{u}_1)$ , визначених на множині  $\mathcal{J} \times \mathcal{U}$  з такою нормою:  $\|f_1\|_{L^1(\mathcal{J} \times \mathcal{U})} = \sum_{j_1 \in \mathcal{J}\mathcal{U}} \int du_1 |f_1(\mathbf{u}_1)|$ . Розглянемо стани системи статистично незалежних багатьох марковських процесів, тобто стани, які в початковий момент часу описуються послідовністю маргінальних функцій розподілу, що задовольняють умову хаосу [8]:  $F^{(c)} = (1, F_1^{0,\varepsilon}(\mathbf{u}_1), \dots, \prod_{i=1}^s F_1^{0,\varepsilon}(\mathbf{u}_i), \dots)$ , де  $F_1^{0,\varepsilon} \in L^1(\mathcal{J} \times \mathcal{U})$ . У цьому випадку середні значення (математичні сподівання) маргінальних спостережуваних (2) визначаються за допомогою такого функціонала:

$$\langle B(t) | F^{(c)} \rangle = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} \int_{(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^s} d\mathbf{u}_1 \cdots d\mathbf{u}_s B_s(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_s) \prod_{i=1}^s F_1^{0,\varepsilon}(\mathbf{u}_i). \quad (4)$$

Оскільки для функцій (2) за умови  $\gamma < e^{-1}$  справедлива оцінка  $\|B(t)\|_{C_\gamma} \leq e^2(1 - \gamma e)^{-1} \|B(0)\|_{C_\gamma}$ , функціонал (4) існує за умови, що  $\|F_1^{0,\varepsilon}\|_{L^1(\mathcal{J} \times \mathcal{U})} < \gamma$ .

Сформулюємо основний результат роботи. Для функціонала (4) справедливе зображення

$$\langle B(t) | F^{(c)} \rangle = \langle B(0) | F(t | F_1(t)) \rangle, \quad (5)$$

де  $F(t | F_1(t)) = (1, F_1(t), F_2(t | F_1(t)), \dots, F_s(t | F_1(t)), \dots)$  — послідовність маргінальних функціоналів стану, які є функціоналами відносно одночастинкової (маргінальної) функції розподілу

$$F_1(t, \mathbf{u}_1) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^n} d\mathbf{u}_2 \cdots d\mathbf{u}_{n+1} \mathfrak{A}_{1+n}^*(t, 1, \dots, n+1) \prod_{i=1}^{n+1} F_1^{0,\varepsilon}(\mathbf{u}_i). \quad (6)$$

Твірний еволюційний оператор  $\mathfrak{A}_{1+n}^*(t)$ ,  $n \geq 0$ , ряду (6) — кумулянт  $(1+n)$ -го порядку півгруп операторів  $\{e^{t\Lambda^*n}\}_{t \geq 0}$ ,  $n \geq 1$ , інфінітезимальний генератор  $\Lambda^*_n$  яких є спряженим оператором до оператора (1) у сенсі функціонала (4), та в просторі  $L^1((\mathcal{J} \times \mathcal{U})^n)$  він визначається за формулою

$$\begin{aligned} (\Lambda^*_n f_n)(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) &= \sum_{k=1}^N \varepsilon^{k-1} \sum_{i_1 \neq \dots \neq i_k=1}^n (\Lambda^{*[k]}(i_1, \dots, i_k) b_n)(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) \doteq \\ &\doteq \sum_{k=1}^N \varepsilon^{k-1} \sum_{i_1 \neq \dots \neq i_k=1}^n \left( \int_{\mathcal{J} \times \mathcal{U}} A^{[k]}(\mathbf{u}_{i_1}; \mathbf{v}, \mathbf{u}_{i_2}, \dots, \mathbf{u}_{i_k}) a^{[k]}(\mathbf{v}, \mathbf{u}_{i_2}, \dots, \mathbf{u}_{i_k}) \times \right. \\ &\quad \left. \times f_n(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{i_1-1}, \mathbf{v}, \mathbf{u}_{i_1+1}, \dots, \mathbf{u}_n) d\mathbf{v} - a^{[k]}(\mathbf{u}_{i_1}, \dots, \mathbf{u}_{i_k}) f_n(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) \right), \quad (7) \end{aligned}$$

де функції  $A^{[k]}$  і  $a^{[k]}$  визначено вище у формулі (1).

Інші елементи послідовності  $F(t | F_1(t))$  визначаються розкладами в такі ряди:

$$\begin{aligned} F_s(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_s | F_1(t)) &\doteq \\ &\doteq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^n} d\mathbf{u}_{s+1} \cdots d\mathbf{u}_{s+n} \mathfrak{V}_{1+n}(t, \{Y\}, X \setminus Y) \prod_{i=1}^{s+n} F_1(t, \mathbf{u}_i), \quad (8) \end{aligned}$$

де твірні еволюційні оператори  $\mathfrak{V}_{1+n}(t)$ ,  $n \geq 0$ , визначаються такими розкладами:

$$\begin{aligned} \mathfrak{V}_1(t, \{Y\}) &= \widehat{\mathfrak{A}}_1(t, \{Y\}) \doteq e^{t\Lambda^*_s} \prod_{i=1}^s e^{-t\Lambda^{*[1]}(i)}, \\ \mathfrak{V}_2(t, \{Y\}, s+1) &= \widehat{\mathfrak{A}}_2(t, \{Y\}, s+1) - \widehat{\mathfrak{A}}_1(t, \{Y\}) \sum_{i_1=1}^s \widehat{\mathfrak{A}}_2(t, i_1, s+1), \\ \mathfrak{V}_3(t, \{Y\}, s+1, s+2) &= \widehat{\mathfrak{A}}_3(t, \{Y\}, s+1, s+2) - 2! \widehat{\mathfrak{A}}_2(t, \{Y\}, s+1) \sum_{i_1=1}^{s+1} \widehat{\mathfrak{A}}_2(t, i_1, s+2) - \\ &- \widehat{\mathfrak{A}}_1(t, \{Y\}) \left( \sum_{i_1=1}^s \widehat{\mathfrak{A}}_3(t, i_1, s+1, s+2) - 2! \sum_{i_1=1}^s \sum_{i_2=1}^{s+1} \widehat{\mathfrak{A}}_2(t, i_1, s+1) \widehat{\mathfrak{A}}_2(t, i_2, s+2) + \right. \\ &\quad \left. + 2! \sum_{1=i_1 < i_2}^s \widehat{\mathfrak{A}}_2(t, i_1, s+1) \widehat{\mathfrak{A}}_2(t, i_2, s+2) \right), \end{aligned}$$

де оператори  $\widehat{\mathfrak{A}}_n(t)$ ,  $n \geq 1$ , з наведених розкладів є кумулянтами відповідного порядку півгруп операторів розсіяння  $\left\{ e^{t\Lambda^*_k} \prod_{i=1}^k e^{-t\Lambda^{*[1]}(i)} \right\}_{t \geq 0}$ ,  $k \geq 1$ . Твірні еволюційні оператори довільного порядку  $\mathfrak{V}_{1+n}(t)$ ,  $n \geq 0$ , визначаються розкладами, подібними до аналогічних розкладів твірних еволюційних операторів у випадку систем багатьох квантових частинок [9]. За умови  $\|F_1(t)\|_{L^1(\mathcal{J} \times \mathcal{U})} < e^{-(3s+2)}$ , для довільного  $t \geq 0$  ряд (8) є збіжним за нормою простору  $L^1((\mathcal{J} \times \mathcal{U})^s)$ .

Зауважимо, що маргінальними функціоналами стану (8) описуються всі можливі кореляції, які виникають у процесі еволюції активної м'якої конденсованої речовини.

Для доведення основного результату встановимо справедливість рівності (5) у випадку спеціальних класів маргінальних спостережуваних.

Оскільки у випадку маргінальних спостережуваних  $B^{(1)}(0) = (0, b_1^\varepsilon(\mathbf{u}_1), 0, \dots)$ , тобто маргінальних спостережуваних адитивного типу [7], розклад (2) набуває вигляду

$$B_s^{(1)}(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_s) = \mathfrak{A}_s(t, Y) \sum_{i=1}^s b_1^\varepsilon(\mathbf{u}_i), \quad s \geq 1,$$

то для функціонала (4) справедливе таке зображення:

$$\langle B^{(1)}(t) | F^c \rangle = \langle B^{(1)}(0) | F(t | F_1(t)) \rangle = \int_{(\mathcal{J} \times \mathcal{U})} d\mathbf{u}_1 b_1^\varepsilon(\mathbf{u}_1) F_1(t, \mathbf{u}_1),$$

де одночастинкова функція розподілу  $F_1(t, \mathbf{u}_1)$  визначається розкладом у ряд (6).

Для маргінальних спостережуваних  $k$ -арного типу, тобто  $B^{(k)}(0) = (0, \dots, 0, b_k^\varepsilon(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k), 0, \dots)$ ,  $k \geq 2$ , справедлива така рівність:

$$\begin{aligned} \langle B^{(k)}(t) | F^c \rangle &= \langle B^{(k)}(0) | F(t | F_1(t)) \rangle = \\ &= \frac{1}{k!} \int_{(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^k} d\mathbf{u}_1 \cdots d\mathbf{u}_k b_k^\varepsilon(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k) F_k(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k | F_1(t)), \end{aligned}$$

де маргінальний функціонал стану  $F_k(t | F_1(t))$  визначається розкладом у ряд (8).

Доведення цієї рівності ґрунтується на застосуванні кластерних розкладів кумулянтів півгруп операторів, які є двоїстими до кінетичних кластерних розкладів кумулянтів півгруп операторів, введених у роботі [9] у випадку квантових систем багатьох частинок.

У просторі  $L^1(\mathcal{J} \times \mathcal{U})$  одночастинкова маргінальна функція розподілу (6) задовольняє таку задачу Коші для немарковського кінетичного рівняння:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} F_1(t, \mathbf{u}_1) &= \Lambda^{*[1]}(1) F_1(t, \mathbf{u}_1) + \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\varepsilon^k}{k!} \int_{(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^k} d\mathbf{u}_2 \cdots d\mathbf{u}_{k+1} \times \\ &\times \sum_{\substack{j_1 \neq \dots \neq j_{k+1} \in \\ \in (1, \dots, k+1)}} \Lambda^{*[k+1]}(j_1, \dots, j_{k+1}) F_{k+1}(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{k+1} | F_1(t)), \end{aligned} \quad (9)$$

$$F_1(t, \mathbf{u}_1)|_{t=0} = F_1^{0,\varepsilon}(\mathbf{u}_1), \quad (10)$$

де функціонали  $F_{k+1}(t | F_1(t))$ ,  $k \geq 1$ , визначаються розкладами в ряд (8). У просторі  $L^1(\mathcal{J} \times \mathcal{U})$  для абстрактної задачі Коші (9), (10) справедливе таке твердження.

Якщо  $F_1^{0,\varepsilon} \in L^1(\mathcal{J} \times \mathcal{U})$ , то за умови, що  $\|F_1^{0,\varepsilon}\|_{L^1(\mathcal{J} \times \mathcal{U})} < C < +\infty$ , існує єдиний глобальний сильний розв'язок задачі Коші для немарковського кінетичного рівняння (9), (10), який визначається розкладом у ряд (6).

Таким чином, якщо стан системи взаємодіючих стохастичних процесів, якими моделюється еволюція активної м'якої конденсованої речовини, в початковий момент часу визначається одночастинковою маргінальною функцією розподілу, то всі можливі стани системи в довільний момент часу можуть бути описані в термінах одночастинкової маргінальної

функції розподілу, яка є розв'язком задачі Коші для немарковського кінетичного рівняння (9), (10).

За допомогою немарковського кінетичного рівняння (9) в скейлінгових границях можна обґрунтувати кінетичні рівняння марковського типу для активної м'якої речовини. Розглянемо асимптотичну поведінку розв'язку (6) задачі Коші для немарковського кінетичного рівняння (9), (10) в границі самоузгодженого поля для системи, яка складається з двох субпопуляцій, тобто випадок  $N = 2$ .

Нехай функція розподілу  $f_1^0 \in L^1(\mathcal{J} \times \mathcal{U})$  — границя самоузгодженого поля початкових даних (10), тобто існує така границя:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|\varepsilon F_1^{\varepsilon, 0} - f_1^0\|_{L^1(\mathcal{J} \times \mathcal{U})} = 0.$$

Тоді на скінченному проміжку часу  $t \in (0, t_0)$  у такому ж сенсі існує границя самоузгодженого поля розв'язку (6) задачі Коші для немарковського кінетичного рівняння (9), (10)

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|\varepsilon F_1(t) - f_1(t)\|_{L^1(\mathcal{J} \times \mathcal{U})} = 0, \quad (11)$$

яка зображується розкладом у ряд

$$\begin{aligned} f_1(t, \mathbf{u}_1) &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \int_{(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^n} d\mathbf{u}_2 \cdots d\mathbf{u}_{n+1} e^{(t-t_1)\Lambda^{*[1]}(1)} \Lambda^{*[2]}(1, 2) \times \\ &\times \prod_{j_1=1}^2 e^{(t_1-t_2)\Lambda^{*[1]}(j_1)} \cdots \prod_{j_{n-1}=1}^n e^{(t_{n-1}-t_n)\Lambda^{*[1]}(j_{n-1})} \sum_{i_n=1}^n \Lambda^{*[2]}(i_n, 1+n) \times \\ &\times \prod_{j_n=1}^{1+n} e^{t_n \Lambda^{*[1]}(j_n)} \prod_{i=1}^{1+n} f_1^0(\mathbf{u}_i). \end{aligned} \quad (12)$$

Якщо  $f_1^0 \in L^1(\mathcal{J} \times \mathcal{U})$ , то гранична функція розподілу (12) є сильним розв'язком задачі Коші для кінетичного рівняння самоузгодженого поля [5]:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_1(t, \mathbf{u}_1) = \Lambda^{*[1]}(1) f_1(t, \mathbf{u}_1) + \int_{\mathcal{J} \times \mathcal{U}} d\mathbf{u}_2 \Lambda^{*[2]}(1, 2) f_1(t, \mathbf{u}_1) f_1(t, \mathbf{u}_2), \quad (13)$$

$$f_1(t, \mathbf{u}_1)|_{t=0} = f_1^0(\mathbf{u}_1). \quad (14)$$

У випадку системи, яка складається з довільної кількості взаємодіючих субпопуляцій  $N \geq 1$ , кінетичне рівняння самоузгодженого поля має вигляд

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_1(t, \mathbf{u}_1) &= \Lambda^{*[1]}(1) f_1(t, \mathbf{u}_1) + \sum_{k=1}^{N-1} \frac{1}{k!} \times \\ &\times \int_{(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^k} d\mathbf{u}_2 \cdots d\mathbf{u}_{k+1} \sum_{j_1 \neq \cdots \neq j_{k+1} \in (1, \dots, k+1)} \Lambda^{*[k+1]}(j_1, \dots, j_{k+1}) \prod_{i=1}^{k+1} f_1(t, \mathbf{u}_i). \end{aligned} \quad (15)$$

Розглянемо в наближенні самоузгодженого поля поведінку нерівноважних кореляцій активної м'якої конденсованої речовини. Оскільки розв'язок (6) задачі Коші для немарков-



ського кінетичного рівняння (9), (10) збігається до розв'язку (12) задачі Коші (13), (14) в сенсі (11), то для маргінальних функціоналів (8) маємо

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{(\mathcal{J} \times \mathcal{U})^s} d\mathbf{u}_1 \cdots d\mathbf{u}_s \left| \varepsilon^s F_s(t, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_s | F_1(t)) - \prod_{j=1}^s f_1(t, \mathbf{u}_j) \right| = 0,$$

де гранична функція розподілу визначається розкладом у ряд (12). Це твердження інтерпретується як властивість поширення початкового хаосу в наближенні самоузгодженого поля, тобто в цьому наближенні складові активної м'якої речовини в процесі еволюції залишаються статистично незалежними.

Доведення сформульованого твердження ґрунтується на застосуванні відповідних формул для кумулянтів асимптотично збурених підгруп операторів розсіяння.

Таким чином, у роботі на основі непертурбативного розв'язку (2) рекурсивних еволюційних рівнянь для маргінальних спостережуваних системи багатьох взаємодіючих стохастичних процесів розвинуто метод виведення немарковського кінетичного рівняння (9), яким описуються колективні властивості активної м'якої речовини.

Одна з переваг такого підходу полягає в можливості побудови кінетичних рівнянь у скейлінгових границях у випадку початкових станів активної м'якої речовини в конденсованих станах, які характеризуються наявністю кореляцій [10]. Також зазначимо, що метод виведення кінетичного рівняння самоузгодженого поля (15) з немарковського кінетичного рівняння (9) дає можливість будувати поправки за малим параметром до інтеграла зіткнень кінетичного рівняння (15), що може бути суттєвим для опису нерівноважних властивостей систем математичної біології.

*Робота частково підтримана проектом “Mathematics for Life Sciences”, FP7-People-2011-IRSES No. 295164.*

1. Marchetti M. C., Joanny J. F., Ramaswamy S. et al. Hydrodynamics of soft active matter // Rev. Mod. Phys. – 2013. – **85**. – P. 1143–1195.
2. Bellouquid A., Delitala M. Mathematical modeling of complex biological systems: a kinetic theory approach. – Boston: Birkhäuser, 2006. – 195 p.
3. Lachowicz M. Links between microscopic and macroscopic descriptions // Multiscale Problems in the Life Sciences. From Microscopic to Macroscopic. – Berlin: Springer, 2008. – P. 201–215.
4. Lachowicz M. Individually-based Markov processes modeling nonlinear systems in mathematical biology // Nonlinear Analysis: Real World Applications – 2011. – **12**. – P. 2396–2408.
5. Gerasimenko V. I., Fedchun Yu. Yu. On kinetic models for the evolution of many-entity systems in mathematical biology // J. Coupled Syst. Multiscale Dyn. – 2013. – **1**, No 2. – P. 273–279.
6. Gerasimenko V. I., Fedchun Yu. Yu. Nonperturbative solution expansions of hierarchies of evolution equations in functional derivatives // Proc. Inst. Math. NASU. – 2012. – **9**, No 2. – P. 347–375.
7. Borgioli G., Gerasimenko V. I. Initial-value problem of the quantum dual BBGKY hierarchy // Nuovo Cimento C. – 2010. – **33**, No 1. – P. 71–78.
8. Cercignani C., Gerasimenko V. I., Petrina D. Ya. Many-particle dynamics and kinetic equations. – Dordrecht: Kluwer, 1997. – 252 p.
9. Gerasimenko V. I., Tsvir Zh. A. A description of the evolution of quantum states by means of the kinetic equation // J. Phys. A: Math. Theor. – 2010. – **43**, No 48. – 485203.
10. Gerasimenko V. I., Tsvir Zh. A. On quantum kinetic equations of many-particle systems in condensed states // Physica A: Stat. Mech. Appl. – 2012. – **391**, No 24. – P. 6362–6366.

*Інститут математики НАН України, Київ  
Київський національний університет  
ім. Тараса Шевченка*

*Надійшло до редакції 19.12.2013*

**В. И. Герасименко, Ю. Ю. Федчун**

### **Кинетические уравнения активного мягкого вещества**

*Построено немарковское обобщение кинетического уравнения для системы взаимодействующих стохастических марковских процессов, которыми моделируется эволюция активного мягкого конденсированного вещества. Для таких систем обосновано кинетическое уравнение в скейлинговом пределе самосогласованного поля и установлено свойство распространения начального хаоса активного мягкого вещества.*

**V. I. Gerasimenko, Yu. Yu. Fedchun**

### **Kinetic equations of soft active matter**

*We construct a non-Markovian generalization of the kinetic equation for a system of interacting stochastic Markovian processes modeling the evolution of soft active matter. For such systems, we substantiate the kinetic equation in the mean field scaling limit and establish the property of the initial chaos to propagate in soft active matter.*

## О регулярных решениях задачи Римана–Гильберта для уравнений Бельтрами

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

Для невырожденных уравнений Бельтрами в единичном круге доказано существование регулярных решений задачи Римана–Гильберта с коэффициентами ограниченной вариации и почти непрерывными граничными данными.

Обозначим через  $\mathbb{D}$  единичный круг в комплексной плоскости  $\mathbb{C}$  и пусть  $\mu: \mathbb{D} \rightarrow \mathbb{C}$  — измеримая функция с  $|\mu(z)| < 1$  п. в. Уравнением Бельтрами с коэффициентом  $\mu$  называется уравнение вида

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

где  $f_{\bar{z}} = \bar{\partial}f = (f_x + if_y)/2$ ,  $f_z = \partial f = (f_x - if_y)/2$ ,  $z = x + iy$ ,  $f_x$  и  $f_y$  — частные производные функции  $f: \mathbb{D} \rightarrow \mathbb{C}$  по  $x$  и  $y$  соответственно. Уравнение (1) называется невырожденным, если  $\|\mu\|_\infty < 1$ .

В 1904 г. Д. Гильберт поставил следующую проблему, которую теперь принято называть проблемой Римана–Гильберта. Она состояла в доказательстве существования и нахождения аналитической функции  $f$  в области  $D \subset \mathbb{C}$ , ограниченной спрямляемой жордановой кривой  $K$  с условием

$$\lim_{z \rightarrow \zeta} \operatorname{Re} \overline{\lambda(\zeta)} \cdot f(z) = \varphi(\zeta) \quad \forall \zeta \in K, \quad (2)$$

где им предполагалось, что функции  $\lambda$  и  $\varphi$  непрерывно дифференцируемы относительно натурального параметра длины на кривой  $K$  и что  $|\lambda| \neq 0$  на  $K$ . Поэтому можно считать, что  $|\lambda(\zeta)| \equiv 1$ .

Первый способ решения этой проблемы, основанный на теории сингулярных интегральных уравнений, был предложен самим Д. Гильбертом в работе [1]. Другой способ решения задачи, основанный на редукции к решению соответствующих двух задач Дирихле, был предложен также Д. Гильбертом (см. [2]). О дальнейшей истории вопроса см., например, [3]. Мы следуем второй из упомянутых схем при решении обобщенной задачи Римана–Гильберта для уравнений Бельтрами в единичном круге.

**1. Определения и предварительные замечания.** Наиболее важным для нас является понятие логарифмической емкости (см., например, [4]). Пусть  $E$  — произвольное ограниченное борелевское множество плоскости  $\mathbb{C}$ . Положительным распределением массы на множестве  $E$  называют произвольную неотрицательную вполне аддитивную функцию множества  $\nu$ , определенную на борелевских подмножествах  $E$ , с  $\nu(E) = 1$ . Функцию

$$U^\nu(z) := \int_E \log \left| \frac{1}{z - \zeta} \right| d\nu(\zeta) \quad (3)$$

называют *логарифмическим потенциалом* распределения  $\nu$ . Соответственно, *логарифмической емкостью*  $C(E)$  множества  $E$  называется величина

$$C(E) = e^{-V}, \quad V = \inf_{\nu} V_{\nu}(E), \quad V_{\nu}(E) = \sup_z U^{\nu}(z). \quad (4)$$

Если  $V = \infty$ , то полагают  $C(E) = 0$ . Известно, что  $0 \leq C(E) < \infty$ ,  $C(E_1) \leq C(E_2)$ , если  $E_1 \subseteq E_2$ ;  $C(E) = 0$ , если  $E = \bigcup_{n=1}^{\infty} E_n$  с  $C(E_n) = 0$ ;  $E$  имеет нулевую (хаусдорфову) длину, если  $C(E) = 0$  (см., например [5, с. 155]).

Обозначим через  $A(\zeta_0, \delta)$  дугу единичной окружности  $\partial\mathbb{D}$  с центром в точке  $\zeta_0 \in \partial\mathbb{D}$  длины  $2\delta$ , где  $\delta \in (0, \pi)$ . Назовем множество  $E \subset \partial\mathbb{D}$  *логарифмически тонким в точке*  $\zeta_0 \in \partial\mathbb{D}$ , если при  $\delta \rightarrow 0$

$$C(E \cap A(\zeta_0, \delta)) = o\left(\left(\log \frac{1}{\delta}\right)^{-1}\right). \quad (5)$$

Заметим, что  $C(A(\zeta_0, \delta)) \simeq 1/(\log(1/\delta))$  при  $\delta \rightarrow 0$ , где запись  $u \simeq v$  означает, что для достаточно малых  $\delta$  найдется постоянная  $c \in (0, \infty)$  такая, что  $v/c \leq u \leq c \cdot v$  (см., например, [6, с. 131]). Таким образом, (5) означает, что

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{C(E \cap A(\zeta_0, \delta))}{C(A(\zeta_0, \delta))} = 0, \quad (6)$$

т.е.  $\zeta_0$  является *точкой разрежения для множества*  $E$  относительно логарифмической емкости.

Говорим, что функция  $\varphi: \partial\mathbb{D} \rightarrow \mathbb{R}$  *почти непрерывна* в точке  $\zeta_0 \in \partial\mathbb{D}$ , если найдется некоторое логарифмически тонкое множество  $E \subseteq \partial\mathbb{D}$  такое, что  $\varphi(\zeta) \rightarrow \varphi(\zeta_0)$  при  $\zeta \rightarrow \zeta_0$  вдоль множества  $\partial\mathbb{D} \setminus E$ . Другими словами,  $\varphi$  *аппроксимативно непрерывна в точке*  $\zeta_0$  относительно логарифмической емкости. Говорим также, что  $\varphi$  *почти непрерывна на*  $\partial\mathbb{D}$ , если она почти непрерывна в каждой точке  $\zeta_0 \in \partial\mathbb{D}$ , за исключением, быть может, множества логарифмической емкости нуль. Все эти понятия инвариантны относительно квазиконформных отображений комплексной плоскости на себя, сохраняющих единичную окружность, поскольку такие отображения непрерывны по Гельдеру на  $\partial\mathbb{D}$ .

Под *регулярным решением задачи Римана–Гильберта* (2) для уравнения Бельтрами (1) будем понимать непрерывное в  $\mathbb{C}$ , дискретное и открытое отображение  $f: \mathbb{D} \rightarrow \mathbb{C}$  класса  $W_{\text{loc}}^{1,1}$ , которое удовлетворяет уравнению (1) п.в. и граничному условию (2) вдоль некасательных путей для всех  $\zeta \in \partial\mathbb{D}$ , за исключением, быть может, множества логарифмической емкости нуль. Напомним, что отображение  $f: \mathbb{D} \rightarrow \mathbb{C}$  *дискретно*, если прообраз  $f^{-1}(y)$  каждой точки  $y \in \mathbb{C}$  состоит из изолированных точек, и *открыто*, если образ любого открытого множества  $U \subseteq \mathbb{D}$  является открытым в  $\mathbb{C}$ .

Мы называем  $\lambda: \partial\mathbb{D} \rightarrow \mathbb{C}$  *функцией ограниченной вариации*, пишем  $\lambda \in \mathcal{BV}(\partial\mathbb{D})$ , если  $V_{\lambda}(\partial\mathbb{D}) := \sup \sum_{j=1}^k |\lambda(\zeta_{j+1}) - \lambda(\zeta_j)| < \infty$ , где супремум берется над всеми конечными наборами точек  $\zeta_j \in \partial\mathbb{D}$ ,  $j = 1, \dots, k$ , с циклическим порядком, означающим, что  $\zeta_j$  лежит между  $\zeta_{j+1}$  и  $\zeta_{j-1}$  для каждого  $j = 1, \dots, k$ . Здесь мы предполагаем, что  $\zeta_{k+1} = \zeta_1 = \zeta_0$ . Для функции  $\lambda \in \mathcal{BV}(\partial\mathbb{D})$  с  $|\lambda(\zeta)| \equiv 1$ , ее *индекс* есть целое число  $I_{\lambda} = \Delta/2\pi$ , где  $\Delta = \Delta_{\partial\mathbb{D}} \arg \lambda$  — приращение аргумента функции  $\lambda(\zeta)$ , когда точка  $\zeta$  обходит окружность  $\partial\mathbb{D}$  один раз против часовой стрелки.

## 2. Основной результат.

**Теорема 1.** Пусть  $\mu: \mathbb{D} \rightarrow \mathbb{C}$  — измеримая функция с  $\|\mu\|_\infty < 1$ ,  $\lambda: \partial\mathbb{D} \rightarrow \mathbb{C}$  — функция ограниченной вариации с  $|\lambda(\zeta)| \equiv 1$  и  $\varphi: \partial\mathbb{D} \rightarrow \mathbb{R}$  — почти непрерывная функция. Если  $I_\lambda \geq 0$ , то существует регулярное решение  $f$  задачи Римана–Гильберта (2) для уравнения Бельтрами (1).

Действительно, продолжая  $\mu$  нулем всюду вне  $\mathbb{D}$ , получаем существование квазиконформного отображения  $f: \overline{\mathbb{C}} \rightarrow \overline{\mathbb{C}}$  с нормировками  $f(0) = 0$ ,  $f(1) = 1$  и  $f(\infty) = \infty$ , удовлетворяющего уравнению Бельтрами (1) (см., например, теорему V.1.3 в [8]). Жорданова область  $f(\mathbb{D})$  по теореме Римана может быть отображена с помощью конформного отображения  $g$  на  $\mathbb{D}$  с нормировками  $g(0) = 0$  и  $g(1) = 1$ . Ясно, что  $h := g \circ f$  — квазиконформный гомеоморфизм с  $h(0) = 0$  и  $h(1) = 1$ , удовлетворяющий тому же уравнению Бельтрами (1).

По принципу отражения (см., например, теорему I.8.4 в [8]), привлекая инверсию относительно единичной окружности в образе и прообразе, мы можем продолжить  $h$  до квазиконформного отображения  $H: \overline{\mathbb{C}} \rightarrow \overline{\mathbb{C}}$  с нормировками  $H(0) = 0$ ,  $H(1) = 1$  и  $H(\infty) = \infty$ . Так как  $H$  и  $H^{-1}$  являются непрерывными по Гельдеру на  $\partial\mathbb{D}$  (см., например, теорему II.4.3 в [8]), имеем, что функция  $\Phi = \varphi \circ H^{-1}$  является почти непрерывной. Ясно также, что  $\Lambda = \lambda \circ H^{-1}$  — ограниченной вариации.

Рассмотрим задачу Римана–Гильберта для аналитических функций  $F$ :

$$\lim_{z \rightarrow \zeta} \overline{\Lambda(\zeta)} \cdot F(z) = \Phi(\zeta) \quad (7)$$

с пределом вдоль некасательных путей везде на  $\partial\mathbb{D}$ , за исключением, быть может, некоторого множества логарифмической емкости нуль.

Прежде всего рассмотрим случай, когда  $I_\Lambda = 0 = I_\lambda$ . Тогда  $\lambda(\zeta) = e^{i\alpha(\zeta)}$ , где функция аргумента  $\alpha = \alpha_\Lambda: \partial\mathbb{D} \rightarrow \mathbb{R}$  является однозначной функцией ограниченной вариации, и

$$G(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial\mathbb{D}} \alpha(\zeta) \frac{z + \zeta}{z - \zeta} \frac{d\zeta}{\zeta}, \quad z \in \mathbb{D},$$

является аналитической функцией в  $\mathbb{D}$  с  $u(z) = \operatorname{Re} G(z) \rightarrow \alpha(\zeta)$  при  $z \rightarrow \zeta$  для всех  $\zeta \in \partial\mathbb{D}$ , за исключением (счетного числа) точек разрыва функции  $\alpha$  (см., например, теоремы I. D.2.2 в [9]). В силу ограниченности  $\alpha$ ,  $u \in h^p$  для всех  $p \geq 1$  по теореме IX.2.3 в [10] и, следовательно,  $v = \operatorname{Im} G \in h^p$  для всех  $p \geq 1$  (см., например, теорему IX.3.4 в [10]). Поэтому найдется функция  $\beta: \partial\mathbb{D} \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $\beta \in L^p$ , такая, что  $v(z) \rightarrow \beta(\zeta)$  при  $z \rightarrow \zeta$  для п. в.  $\zeta \in \partial\mathbb{D}$  вдоль некасательных путей (см., например, следствие IX.2.2 в [10]).

Более того, поскольку  $\alpha \in \mathcal{BV}(\partial\mathbb{D})$ , функция  $\beta$  является почти непрерывной функцией на  $\partial\mathbb{D}$  и найдется множество  $E \subseteq \partial\mathbb{D}$  логарифмической емкости нуль такое, что  $v(z) \rightarrow \beta(\zeta)$  при  $z \rightarrow \zeta$  вдоль любых некасательных путей для всех  $\zeta \in \partial\mathbb{D} \setminus E$  (см. теорему 1 в [7], а также теоремы I. E.3.2 и I. E.4.1 в [9] и теорему IX.1.3 в [10]). Таким образом,  $G(z) \rightarrow \alpha(\zeta) + i\beta(\zeta)$  при  $z \rightarrow \zeta$  вдоль любых некасательных путей для всех  $\zeta \in \partial\mathbb{D} \setminus \mathcal{E}$ , где  $\mathcal{E}$  — подмножество  $\partial\mathbb{D}$  логарифмической емкости нуль.

Далее, поскольку функции  $\Phi$  и  $\beta$  почти непрерывны на  $\partial\mathbb{D}$ , то функция  $\Psi = \Phi e^\beta$  также почти непрерывна. Но тогда в единичном круге  $\partial\mathbb{D}$  найдется гармоническая функция  $U$  такая, что  $U(z) \rightarrow \Psi(\zeta)$  при  $z \rightarrow \zeta$  вдоль любых некасательных путей для всех  $\zeta \in \partial\mathbb{D} \setminus \mathcal{E}_*$ , где  $\mathcal{E}_* \subseteq \partial\mathbb{D}$  — некоторое множество логарифмической емкости нуль. Пусть  $\mathcal{A} = U + iV$ , где  $V$  — гармонически сопряженная к  $U$  функция в единичном круге. Элементарные вычисле-

ния показывают, что функция  $F = \mathcal{A} \cdot \mathcal{B}$ , где  $\mathcal{B} = e^{iG}$ , является искомым решением задачи Римана–Гильберта (9) в случае  $I_\lambda = 0$ .

Теперь рассмотрим случай, когда  $I_\lambda > 0$ . Для произвольных  $z_j \in \mathbb{D}$ ,  $j = 1, \dots, I_\lambda$ , положим

$$\lambda^*(\zeta) = \lambda(\zeta) \prod_{j=1}^{I_\lambda} \frac{|\zeta - z_j|}{\zeta - z_j}, \quad \varphi^*(\zeta) = \varphi(\zeta) \prod_{j=1}^{I_\lambda} \frac{1}{|\zeta - z_j|}, \quad \zeta \in \partial\mathbb{D}.$$

Так как  $I_{\lambda_1 \lambda_2} = I_{\lambda_1} + I_{\lambda_2}$ , получаем, что  $I_{\lambda^*} = 0$  и искомое решение имеет вид

$$F(z) = F^*(z) \prod_{j=1}^{I_\lambda} (z - z_j), \quad z \in \mathbb{D},$$

где  $F^*$  — решение задачи Римана–Гильберта из предыдущего абзаца с  $\lambda^*$  и  $\varphi^*$  вместо  $\lambda$  и  $\varphi$  в граничном условии (7).

Наконец, решение исходной задачи Римана–Гильберта (2) для уравнения Бельтрами (1) имеет вид  $f = F \circ H$ .

1. Hilbert D. Über eine Anwendung der Integralgleichungen auf eine Problem der Funktionentheorie // Verhandl. des III Int. Math. Kongr., Heidelberg, 1904. – Leipzig: Teubner, 1905. – P. 233–240.
2. Hilbert D. Grundzüge einer allgemeinen Theorie der linearen Integralgleichungen. – Leipzig: Teubner, 1912. – 282 p.
3. Векун И. Н. Обобщенные аналитические функции. – Москва: Физматгиз, 1959. – 628 с.
4. Носиро К. Предельные множества. – Москва: Изд-во иностр. лит., 1963. – 253 с.
5. Неванлинна Р. Однозначные аналитические функции. – Москва: ОГИЗ, 1941. – 388 с.
6. Adams D. R., Hedberg L. I. Function spaces and potential theory. – Berlin: Springer, 1996. – 366 p.
7. Twomey J. B. The Hilbert transformation and fine continuity // Irish Math. Soc. Bull. – 2006. – No 58. – P. 81–91.
8. Lehto O., Virtanen K. J. Quasiconformal mappings in the plane. – Berlin; Heidelberg: Springer, 1973. – 258 p.
9. Кусис П. Введение в теорию пространств  $H^p$ . – Москва: Мир, 1984. – 368 с.
10. Голузин Г. М. Геометрическая теория функций комплексного переменного. – Москва: Наука, 1966. – 628 с.

Институт прикладной математики  
и механики НАН Украины, Донецк

Поступило в редакцию 18.11.2013

**А. С. Єфімушкін, В. І. Рязанов**

### **Про регулярні розв'язки задачі Рімана–Гільберта для рівнянь Бельтрамі**

*Для невідроджених рівнянь Бельтрамі в одиничному колі доведено існування регулярних розв'язків задачі Рімана–Гільберта з коефіцієнтами, що мають обмежену варіацію, і майже неперервними межовими даними.*

A. S. Yefimushkin, V. I. Ryazanov

**On the regular solutions of the Riemann–Hilbert problem for the Beltrami equations**

*For the non-degenerate Beltrami equations in a unit disk, the existence of regular solutions of the Riemann–Hilbert problem with coefficients of bounded variation and almost continuous boundary data is proved.*

О. В. Іванов, І. В. Орловський

## Асимптотичні властивості оцінки параметрів лінійної регресії у випадку слабо залежних регресорів

(Представлено членом-кореспондентом НАН України П. С. Кноповим)

*Розглядається лінійна модель регресії зі слабо залежним випадковим шумом та регресорами, які залежать від часу та спостерігаються зі слабо залежними похибками. Досліджуються властивості консистентності та асимптотичної нормальності оцінки найменших квадратів параметрів такої моделі регресії.*

У роботі отримано умови консистентності та асимптотичної нормальності оцінки найменших квадратів (о. н. к.) невідомого параметра лінійної моделі регресії з випадковими регресорами та корельованими спостереженнями. Модель такого типу є природним узагальненням класичної моделі типу “сигнал + шум”.

О. н. к. обрано як одну з найважливіших та широко вживаних оцінок параметрів регресійних моделей. Асимптотичні властивості о. н. к. параметрів лінійної та нелінійної регресії, без помилок у регресорах, розглядалися багатьма дослідниками, і ми пошлемося лише на монографії О. В. Іванова та М. М. Леоненка [1], О. В. Іванова [2], в яких міститься достатньо повна бібліографія робіт з даного питання.

Асимптотичні властивості о. н. к. параметрів лінійних моделей з випадковими регресорами та корельованими спостереженнями є менш вивченими. В книзі А. Я. Дороговцева [3] розглядалась асимптотична поведінка о. н. к. параметрів лінійної моделі зі слабо залежними помилками в регресорах, які мають незалежні від часу тренди, та слабо залежним шумом. У статті Л. П. Голубовської, О. В. Іванова та І. В. Орловського [4] досліджено консистентність та асимптотичну нормальність параметрів моделей зі слабо залежними помилками в регресорах і слабо або сильно залежним випадковим шумом.

У роботі увагу зосереджено на отриманні сильної консистентності та асимптотичної нормальності о. н. к. параметрів лінійної моделі зі слабо залежними помилками в регресорах, які мають залежні від часу тренди.

### 1. Постановка задачі. Розглянемо модель регресії

$$X(t) = \sum_{i=1}^q \theta_i z_i(t) + \varepsilon(t), \quad t \in [0, T], \quad z_i(t) = a_i(t) + y_i(t), \quad i = \overline{1, q}, \quad (1)$$

де  $\theta^* = (\theta_1, \dots, \theta_q) \in \mathbb{R}^q$  — вектор невідомих параметрів (\* означає транспонування),  $a_i: [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^1$ ,  $i = \overline{1, q}$ , — деякі не випадкові неперервні функції і:

**A1.**  $y_i(t)$ ,  $t \in \mathbb{R}^1$ ,  $i = \overline{1, q}$ , — незалежні, неперервні у середньоквадратичному, вимірні стаціонарні гауссівські процеси,  $Ey_i(0) = 0$ .

**A2.** Випадковий шум  $\varepsilon(t)$ ,  $t \in \mathbb{R}^1$ , — неперервний в середньому квадратичному, вимірний, гауссівський стаціонарний процес, що не залежить від  $y_i(t)$ ,  $t \in \mathbb{R}^1$ ,  $i = \overline{1, q}$ ,  $E\varepsilon(0) = 0$ .



**Означення 1.** О. н. к. невідомого параметра  $\theta$ , одержаною за спостереженнями  $\{X(t), z_i(t), i = \overline{1, q}, t \in [0, T]\}$  виду (1), називається будь-який випадковий вектор  $\hat{\theta}_T = \theta_T(X(t), z_i(t), i = \overline{1, q}, t \in [0, T])$ , для якого

$$Q_T(\hat{\theta}_T) = \inf_{\tau \in \mathbb{R}^q} Q_T(\tau), \quad Q_T(\tau) = \int_0^T \left[ X(t) - \sum_{i=1}^q \tau_i z_i(t) \right]^2 dt.$$

Введемо такі позначення:

$$A^*(t) = (a_1(t), \dots, a_q(t)), \quad Y^*(t) = (y_1(t), \dots, y_q(t)), \quad Z(t) = A(t) + Y(t).$$

Тоді

$$\hat{\theta}_T = \Lambda_T^{-1} T^{-1} \int_0^T Z(t) X(t) dt = \theta + \Lambda_T^{-1} T^{-1} \int_0^T Z(t) \varepsilon(t) dt, \quad (2)$$

де  $\Lambda_T = (\Lambda_T^{il})_{i,l=1}^q = T^{-1} \int_0^T Z(t) Z^*(t) dt$ .

**2. Допоміжні твердження.** Розглянемо деякі твердження, які використовуються для отримання основних результатів роботи.

Введемо подальші припущення:

**A3.** Випадкові процеси  $y_i(t), t \in \mathbb{R}^1, i = \overline{1, q}$ , мають абсолютно інтегровані коваріаційні функції (к. ф.)  $B_i(t) = E y_i(0) y_i(t)$ .

Літерами  $k$  будемо позначати додатні константи. Нехай також,

$$d_T^2 = \text{diag}(d_{iT}^2)_{i=1}^q, \quad d_{iT}^2 = \int_0^T a_i^2(t) dt, \quad i = \overline{1, q}.$$

**B1.**  $\lim_{T \rightarrow \infty} T^{-1} d_{iT}^2 = k_i, 0 < k_i < \infty, i = \overline{1, q}$ .

**B2.**  $a_i(t), t \in [0, \infty), i = \overline{1, q}$ , — обмежені функції.

Запишемо

$$J_T = (J_T^{il})_{i,l=1}^q, \quad J_T^{il} = T^{-1} \int_0^T a_i(t) a_l(t) dt.$$

**B3.**  $\lim_{T \rightarrow \infty} J_T = J$ , де  $J = (J^{il})_{i=1}^q$  — деяка додатно визначена матриця.

Введемо також позначення

$$\Lambda = R(0) + J, \quad R(0) = \text{diag}(B_i(0))_{i=1}^q.$$

У нижченаведеній лемі розглянуто асимптотичну поведінку  $\Lambda_T$ .

**Лема 1.** Якщо виконано умови **A1, A3, B1–B3**, то

$$\Lambda_T \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \Lambda, \quad \text{майже напевно (м. н.)}$$

З леми випливає таке твердження.

**Наслідок 1.** Якщо виконано умови **A1**, **A3**, **B1–B3**, то для майже всіх  $\omega \in \Omega$  існує таке  $T_0 = T_0(\omega)$ , що для всіх  $T > T_0$  о. н. к.  $\hat{\theta}_T$ , яку задано (2), є визначеною.

Сформулюємо одну властивість повільно змінної функції (п. з. ф.), яка є узагальненням теореми 2.7 праці [5, с. 65–67] і використовується при доведенні консистентності о. н. к. параметрів моделі (теорема 2).

**Лема 2.** Нехай число  $\eta \geq 0$  та вимірна функція  $f(t, s)$ , визначена на  $(0, \infty) \times (0, \infty)$ , такі, що інтеграл

$$\int_0^\beta \int_0^\beta \frac{f(t, s)}{|t - s|^\eta} dt ds$$

збігається при деякому  $0 < \beta < \infty$ . Нехай п. з. ф.  $L$  обмежена на кожному скінченному інтервалі з  $\mathbb{R}_+$ . Тоді при  $\eta > 0$  виконується співвідношення

$$\int_0^\beta \int_0^\beta L(T|t - s|) f(t, s) dt ds \underset{T \rightarrow \infty}{\sim} L(T) \int_0^\beta \int_0^\beta f(t, s) dt ds.$$

У випадку  $\eta = 0$  для виконання цього співвідношення достатньо неспадання на півосі  $(0, \infty)$  функції  $L$ .

При доведенні асимптотичної нормальності о. н. к. (теорема 5) використовується одно-рідна нерівність Гельдера–Юнга–Браскампа–Ліба, формулювання якої можна знайти в [6, 7].

**3. Сильна консистентність о. н. к.** Зробимо додаткове припущення стосовно процесу  $\varepsilon(t)$ ,  $t \in \mathbb{R}^1$ .

**A4.** Випадковий процес  $\varepsilon(t)$ ,  $t \in \mathbb{R}^1$ , має абсолютно інтегровну к. ф.  $B(t) = E\varepsilon(0)\varepsilon(t)$ .

**Теорема 1.** Якщо виконано умови **A1–A4** та **B1–B3**, то о. н. к.  $\hat{\theta}_T$  є сильно консистентною оцінкою параметрів  $\theta$ , тобто  $\hat{\theta}_T \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \theta$  м. н.

Нехай замість **A4** виконано умову

**A5.** Випадковий шум  $\varepsilon(t)$ ,  $t \in \mathbb{R}^1$ , має к. ф.  $B(t) = L(|t|)|t|^{-\alpha}$ , де  $L(t)$ ,  $t > 0$ , — п. з. ф., яка обмежена на кожному скінченному інтервалі,  $\alpha \in (0, 1/2)$ .

**Теорема 2.** Якщо виконано умови **A1–A3**, **A5** та **B1–B3**, то  $\hat{\theta}_T \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \theta$  м. н.

Зауважимо, що для випадку, коли деякі з  $k_i = \infty$ , є вірними аналогічні результати. У цьому випадку умови **B1–B3** переформулюються таким чином.

**B1'.**  $\lim_{T \rightarrow \infty} T^{-1} d_{iT}^2 = k_i$ ,  $0 < k_i \leq \infty$ ,  $i = \overline{1, q}$ , якщо для деякого  $i$   $k_i = \infty$ , то існує таке  $\mu_i > 0$ , що  $T d_{iT}^{-2} = o(T^{-\mu_i})$ .

**B2'.**  $\sup_{t \in [0, T]} |a_i(t)| d_{iT}^{-1} \leq \check{k}_i T^{-1/2}$ ,  $i = \overline{1, q}$ .

Позначимо

$$\tilde{J}_T = (\tilde{J}_T^{il})_{i,l=1}^q, \quad \tilde{J}_T^{il} = d_{iT}^{-1} d_{lT}^{-1} \int_0^T a_i(t) a_l(t) dt.$$

**B3'.**  $\lim_{T \rightarrow \infty} \tilde{J}_T = \tilde{J}$ , де  $\tilde{J} = (\tilde{J}^{il})_{i,l=1}^q$  — деяка додатно визначена матриця.

**Теорема 3.** Якщо виконано умови **A1–A4** та **B1'–B3'**, то

$$T^{-1/2}d_T(\widehat{\theta}_T - \theta) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 0 \quad \text{м. н.}$$

**Теорема 4.** Якщо виконано умови **A1–A3**, **A5** та **B1'–B3'**, то

$$T^{-1/2}d_T(\widehat{\theta}_T - \theta) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 0 \quad \text{м. н.}$$

**4. Асимптотична нормальність о. н. к.** Введемо матричну міру  $\mu_T(dx)$  на  $(\mathbb{R}^1, \mathcal{B}^1)$  з матрицею щільності

$$(\mu_T^{jl}(x))_{j,l=1}^q,$$

$$\mu_T^{jl}(x) = a_T^j(x) \overline{a_T^l(x)} \left( \int_{\mathbb{R}^1} |a_T^j(x)|^2 dx \int_{\mathbb{R}^1} |a_T^l(x)|^2 dx \right)^{-1/2},$$

$$a_T^j(x) = \int_0^T e^{ixt} a_j(t) dt, \quad j, l = \overline{1, q}.$$

Зауважимо, що  $d_{jT}^2 = (2\pi)^{-1} \int_{\mathbb{R}^1} |a_T^j(x)|^2 dx$ ,  $j = \overline{1, q}$ .

Зазначимо також, що за умови **A4** впливає, що випадковий процес  $\varepsilon(t)$ ,  $t \in \mathbb{R}^1$ , має спектральну щільність  $f_\varepsilon$ .

**B4.** Сім'я мір  $\mu_T(\cdot)$  слабо збігається до міри  $\mu(\cdot)$  при  $T \rightarrow \infty$  та  $\int_{\mathbb{R}^1} f_\varepsilon(x) \mu(dx)$  — додатно визначена матриця.

**Означення 2.** Матрична міра  $\mu(\cdot)$  називається спектральною мірою функції регресії  $\sum_{i=1}^q \theta_i a_i(t)$  (більш детально див. [1, 8, 9]).

Введемо деякі позначення:

$$\Gamma = \text{diag}(k_i)_{i=1}^q, \quad \text{де } k_i \text{ задано в } \mathbf{B1}; \quad b_i = \int_{-\infty}^{\infty} B_i(t) B(t) dt, \quad i = \overline{1, q};$$

$$\sigma = 2\pi \Gamma^{1/2} \left( \int_{\mathbb{R}^1} f_\varepsilon(x) \mu(dx) \right) \Gamma^{1/2} + \text{diag}(b_i)_{i=1}^q.$$

**Теорема 5.** Якщо виконано умови **A1–A4** та **B1–B4**, то розподіл нормованої о. н. к.  $\sqrt{T}(\widehat{\theta}_T - \theta)$  при  $T \rightarrow \infty$  збігається до гауссівського розподілу  $N(0, \Lambda^{-1} \sigma \Lambda^{-1})$ .

Для випадку, коли деякі з  $k_i = \infty$ , теорема 5 переформулюється таким чином.

**Теорема 6.** Якщо виконано умови **A1–A4**, **B1'–B3'** та **B4**, то розподіл нормованої о. н. к.  $d_T(T)(\widehat{\theta}_T - \theta)$  при  $T \rightarrow \infty$  збігається до гауссівського розподілу  $N(0, \widetilde{\Lambda}^{-1} \widetilde{\sigma} \widetilde{\Lambda}^{-1})$ , де

$$\widetilde{\sigma} = 2\pi \int_{\mathbb{R}^1} f_\varepsilon(x) \mu(dx) + \text{diag} \left( \frac{b_i}{k_i} \right)_{i=1}^q,$$

$\widetilde{\Lambda} = \text{diag}((1/k_i) B_i(0))_{i=1}^q + \widetilde{J}$  (вважатимемо, що  $1/k_i = 0$  у випадку  $k_i = \infty$ ).

Отримані результати узагальнюють результати, отримані в [3], та продовжують дослідження [4], розширюючи їх на випадок слабо залежних похибок у спостереженнях.

1. *Иванов А. В., Леоненко Н. Н.* Статистический анализ случайных полей. – Киев: Вища шк., 1986. – 216 с.
2. *Ivanov A. V.* Asymptotic theory of nonlinear regression. – Dordrecht: Kluwer, 1997. – 327 p.
3. *Дороговцев А. Я.* Теория оценок параметров случайных процессов. – Киев: Вища шк., 1982. – 192 с.
4. *Голубовська Л. П., Иванов О. В., Орловський І. В.* Асимптотичні властивості оцінки параметрів лінійної регресії у випадку сильнозалежних регресорів // *Наук. вісті НТУУ “КПІ”*. – 2012. – № 4(84). – С. 26–33.
5. *Сенета Е.* Правильно меняющиеся функции. – Москва: Наука, 1985. – 144 с.
6. *Avram F., Leonenko N., Sakhno L.* On a Szegő type limit theorem, the Hölder–Young–Brascamp–Lieb inequality, and the asymptotic theory of integrals and quadratic forms of stationary fields // *ESAIM: PS*. – 2010. – **14**. – P. 210–255.
7. *Lieb E. H.* Inequalities: selecta of Elliott H. Lieb. – Berlin: Springer, 2000. – 711 p.
8. *Ибрагимов И. А., Розанов Ю. А.* Гауссовские случайные процессы. – Москва: Наука, 1970. – 384 с.
9. *Grenander U., Rosenblatt M.* Statistical analysis of stationary time series. – Stockholm: Almqvist and Wiksell, 1956. – 300 p.

*НТУ України “Київський політехнічний інститут”*

*Надійшло до редакції 05.11.2013*

**А. В. Иванов, И. В. Орловский**

**Асимптотические свойства оценки параметров линейной регрессии в случае слабо зависимых регрессоров**

*Рассматривается линейная модель регрессии со слабо зависимым случайным шумом и регрессорами, которые зависят от времени и наблюдаются со слабо зависимыми ошибками. Исследуются свойства состоятельности и асимптотической нормальности оценки наименьших квадратов параметров такой модели регрессии.*

**A. V. Ivanov, I. V. Orlovsky**

**Asymptotic properties of the estimator of linear regression parameters in the case of weakly dependent regressors**

*A linear regression model with weakly dependent random noise and time-dependent regressors which are observed with weakly dependent errors is considered. The consistency and the asymptotic normality of the least squares estimator of such a regression model are proved.*

Л. А. Курдаченко, І. Я. Субботін, В. А. Чупордя

## Про структуру модулів над узагальнено розв'язними групами

(Представлено членом-кореспондентом НАН України В. П. Моторним)

*Нехай  $R$  — кільце,  $G$  — група. Модуль  $A$  над груповим кільцем  $RG$  будемо називати мінімаксно-антифінитарним  $RG$ -модулем, якщо фактор-модуль  $A/C_A(H)$  є мінімаксним як  $R$ -модуль для будь-якої власної підгрупи  $H$ , яка не є скінченно породженою, але  $R$ -модуль  $A/C_A(G)$  не є мінімаксним. Досліджуються мінімаксно-антифінитарні модулі над цілочисельними груповими кільцями локально узагальнено радикальних груп.*

Нехай  $R$  — кільце,  $G$  — група та  $A$  —  $RG$ -модуль. Модулі над груповими кільцями  $RG$  є старим класичним об'єктом досліджень і знаходять застосування в різних областях алгебри. Випадок, коли група  $G$  є скінченною, вивчається досить детально вже довгий час. Однак у випадку, коли група  $G$  нескінченна, ситуація зовсім інша. Вивчення модулів над майже поліциклічними групами було розпочато в роботах Ф. Холла [1, 2], які вже стали класичними. Зокрема, виявилось, що групове кільце  $RG$  майже поліциклічної групи  $G$  над нетеровим кільцем  $R$  буде нетеровим. Цей факт мав велику роль для розвитку теорії модулів над майже поліциклічними групами. Зараз ця теорія є дуже розвинутою і багатою на цікаві змістовні результати. В цьому плані клас майже поліциклічних груп є винятковим, нічого схожого для інших класів нескінченних груп, навіть таких близьких до скінченних, як черніковські, ми не маємо. Це є однією з причин того, що теорія модулів над іншими типами нескінченних груп не так добре розвинута. Тому вивчення модулів над іншими типами нескінченних груп не може базуватися зараз тільки на вивченні відповідних групових кілець, вона потребує застосування деяких природних обмежень. Зокрема, умови скінченності є природними обмеженнями, що виявилися дуже корисними і вже продемонстрували свою ефективність. Першими природними обмеженнями, які впливають з класичної теорії кілець та модулів, є обмеження, що дають близькість до таких класичних умов, як умови “бути нетеровим модулем” та “бути артіновим модулем”. Нетерові та артінові модулі вивчаються вже досить давно. Багато аспектів теорії артінових модулів над груповими кільцями було відображено в книзі [3]. Не так давно в теорії нескінченно вимірних лінійних груп почав інтенсивно застосовуватися так званий фінитарний підхід. Він виявився досить результативним і приніс багато цікавих результатів.

Нехай  $R$  — кільце,  $G$  — група та  $A$  — модуль над груповим кільцем  $RG$ . Для підгрупи  $H$  групи  $G$  розглянемо її централізатор

$$C_A(H) = \{a \in A \mid ah = a \text{ для кожного елемента } h \in H\}$$

в модулі  $A$ . Очевидно,  $C_A(H)$  буде  $RH$ -підмодулем  $A$  та  $H$  реально діє на  $A/C_A(H)$ .  $R$ -фактор-модуль  $A/C_A(H)$  називається *коцентралізатором*  $H$  в  $A$ . Фактор-група  $H/C_H(A/C_A(H))$  буде ізоморфною до підгрупи групи автоморфізмів  $R$ -модуля  $A/C_A(H)$ .

Якщо  $x$  — елемент  $C_H(A/C_A(H))$ , то  $x$  діє тотожно на факторах ряду  $\langle 0 \rangle \leq C_A(H) \leq A$ . Звідси отримуємо, що підгрупа  $C_H(A/C_A(H))$  буде абелевою. Це показує, що структура  $H$  значною мірою визначається структурою  $C_H(A/C_A(H))$ , а отже, структурою групи автоморфізмів  $R$ -модуля  $A/C_A(H)$ .

Нехай  $\mathfrak{M}$  — деякий клас  $R$ -модулів. Будемо говорити, що  $A$  є  $\mathfrak{M}$ -фінітарним модулем над  $RG$ , якщо  $A/C_A(x) \in \mathfrak{M}$  для кожного елемента  $x \in G$ . Якщо  $R$  — поле і  $C_G(A) = \langle 1 \rangle$ , а  $\mathfrak{M}$  — клас скінченновимірних векторних просторів над  $R$ , то приходимо до фінітарних лінійних груп. Теорія фінітарних лінійних груп є досить добре розвиненою (див., наприклад, [4]). Б. Верфрітц розпочав розгляд випадків, коли  $\mathfrak{M}$  — клас скінченних  $R$ -модулів [5–8], коли  $\mathfrak{M}$  — клас нетерових  $R$ -модулів [9] та коли  $\mathfrak{M}$  — клас артінових  $R$ -модулів [7, 8, 10, 11]. Артіново-фінітарні модулі розглядалися також у статті [12]. Артінові та нетерові модулі можуть бути об'єднані таким чином.  $R$ -модуль  $A$  називається мінімаксним, якщо  $A$  має скінченний ряд підмодулів, фактори якого нетерові або артінові. Неважко показати, що у випадку, коли  $R$  — комутативне кільце без дільників нуля, то кожний мінімаксний  $R$ -модуль  $A$  містить у собі такий нетеровий підмодуль  $B$ , що  $A/B$  є артіновим. Першим природним випадком тут є випадок, коли  $R = \mathbb{Z}$  є кільцем всіх цілих чисел. Б. Верфрітц розпочав розгляд нетерово-фінітарних та артіново-фінітарних модулів саме з розгляду модулів над цілочисельними груповими кільцями. Цей випадок знаходить важливі застосування, зокрема, для узагальнено розв'язних груп.

Нехай  $\mathfrak{M}$  — деякий клас  $R$ -модулів. Покладемо

$$\mathcal{C}_{\mathfrak{M}}(G) = \{H \mid H \text{ — підгрупа групи } G, \text{ що має властивість } A/C_A(H) \in \mathfrak{M}\}.$$

Якщо  $A$  — це  $\mathfrak{M}$ -фінітарний модуль, то система  $\mathcal{C}_{\mathfrak{M}}(G)$  містить усі циклічні підгрупи (більш того, всі скінченно породжені підгрупи у випадку, коли  $\mathfrak{M}$  задовольняє деякі природні обмеження). Очевидно, будова групи  $G$  суттєво залежить від того, яка з важливих природних систем її підгруп містить  $\mathcal{C}_{\mathfrak{M}}(G)$ . Тому природно було б розглянути ситуації, коли система  $\mathcal{C}_{\mathfrak{M}}(G)$  є досить великою. Зокрема, великими системами підгруп групи  $G$  є система всіх її власних підгруп та система всіх її підгруп, що не є скінченно породженими. Наприклад, якщо система  $\mathcal{C}_{\mathfrak{M}}(G)$  містить у собі всі підгрупи, що не є скінченно породженими, то отримуємо ситуацію, яка є дуальною до  $\mathfrak{M}$ -фінітарних модулів.

Нехай  $R$  — кільце,  $G$  — група та  $A$  —  $RG$ -модуль. Будемо говорити, що  $A$  є мінімаксно-антифінітарним  $RG$ -модулем, якщо фактор-модуль  $A/C_A(H)$  є мінімаксним як  $R$ -модуль для будь-якої власної підгрупи  $H$ , яка не є скінченно породженою, але  $R$ -модуль  $A/C_A(G)$  не є мінімаксним.

При вивченні структури мінімаксно-антифінітарних  $\mathbb{Z}G$ -модулів значну роль відіграє така підгрупа. Покладемо

$$\text{Coc}_{\mathbb{Z}-\text{mmx}}(G) = \{x \mid A/C_A(x) \text{ є мінімаксним } \mathbb{Z}\text{-модулем}\}.$$

Вивчення мінімаксно-антифінітарних  $\mathbb{Z}G$ -модулів розпадається на три природні частини. Першим є випадок, коли  $G = \text{Coc}_{\mathbb{Z}-\text{mmx}}(G)$ . У цьому випадку кожна власна підгрупа  $G$  має мінімаксний коцентралізатор. Ми будемо розглядати модулі над групами, які належать до нижченаведеного дуже широкого класу груп.

Групу  $G$  будемо називати узагальнено радикальною, якщо  $G$  має зростаючий ряд, фактори якого або локально нільпотентні, або локально скінченні. Зокрема, узагальнено радикальна група  $G$  має зростаючу локально нільпотентну підгрупу або зростаючу локально

скінченну підгрупу. У першому випадку її локально нільпотентний радикал буде неодиначним, а у другому випадку неодиначним буде її локально скінченний радикал. Отже, узагальнено радикальна група  $G$  має зростаючий ряд нормальних підгруп з локально нільпотентними або локально скінченими факторами. Група  $G$  називається *локально узагальнено радикальною*, якщо кожна її скінченно породжена підгрупа є узагальнено радикальною. Клас локально узагальнено радикальних груп є дуже широким, зокрема, він містить всі локально скінченні та всі локально розв'язні групи.

**Теорема 1.** *Нехай  $G$  — локально узагальнено радикальна група та  $A$  —  $\mathbb{Z}G$ -модуль, для якого  $A/C_A(G)$  не є  $\mathbb{Z}$ -мінімаксним. Якщо фактор-модуль  $A/C_A(H)$  є  $\mathbb{Z}$ -мінімаксним для кожної власної підгрупи  $H$  групи  $G$ , то  $G/C_G(A)$  є циклічною або квазіциклічною  $p$ -групою для деякого простого числа  $p$ .*

**Наслідок N.** *Нехай  $G$  — локально узагальнено радикальна група та  $A$  —  $\mathbb{Z}G$ -модуль, для якого  $A/C_A(G)$  не є  $\mathbb{Z}$ -нетеровим. Якщо фактор-модуль  $A/C_A(H)$  є  $\mathbb{Z}$ -нетеровим для кожної власної підгрупи  $H$  групи  $G$ , то  $G/C_G(A)$  є циклічною або квазіциклічною  $p$ -групою для деякого простого числа  $p$ .*

**Наслідок A.** *Нехай  $G$  — локально узагальнено радикальна група та  $A$  —  $\mathbb{Z}G$ -модуль, для якого  $A/C_A(G)$  не є  $\mathbb{Z}$ -артіновим. Якщо фактор-модуль  $A/C_A(H)$  є  $\mathbb{Z}$ -артіновим для кожної власної підгрупи  $H$  групи  $G$ , то  $G/C_G(A)$  є циклічною або квазіциклічною  $p$ -групою для деякого простого числа  $p$ .*

Результат, аналогічний теоремі 1, має місце і для інших класів груп. Зокрема, має місце

**Наслідок D.** *Нехай  $G$  — група, що не збігається зі своїм комутантом, та  $A$  —  $\mathbb{Z}G$ -модуль, для якого  $A/C_A(G)$  не є  $\mathbb{Z}$ -мінімаксним. Якщо фактор-модуль  $A/C_A(H)$  є  $\mathbb{Z}$ -мінімаксним для кожної власної підгрупи  $H$  групи  $G$ , то  $G/C_G(A)$  є циклічною або квазіциклічною  $p$ -групою для деякого простого числа  $p$ .*

Дійсно, застосувавши ті ж самі аргументи, які були застосовані в розділі 2 роботи [13], можна звести загальну ситуацію до випадку, коли група  $G$  не містить у собі власних підгруп скінченного індексу, не може бути скінченно породженою та  $G/[G, G]$  буде квазіциклічною групою. Нехай  $K/[G, G]$  — власна підгрупа  $G/[G, G]$ , тоді  $A/C_A(K)$  —  $\mathbb{Z}$ -мінімаксний модуль. Зокрема, його періодична частина  $T/C_A(K)$  буде черніковською. Оскільки  $K$  нормальна в  $G$ , то  $C_A(K)$  та  $T$  будуть  $\mathbb{Z}G$ -підмодулями. Відомо, що група автоморфізмів абелевої черніковської групи є резидуально скінченною, а оскільки  $G$  не має власних підгруп скінченного індексу, то  $G$  діє тотожно на  $T/C_A(K)$ , тобто  $[T, G] \leq C_A(K)$ .  $A/T$  є мінімаксною і не має скруту, а тому вона є резидуально скінченною. Звідси випливає включення  $[A, G] \leq T$ . А отже,  $[[A, G], G] \leq C_A(K)$ . Останнє включення має місце для кожної власної підгрупи  $K \geq [G, G]$ , а оскільки  $G$  є об'єднанням усіх таких підгруп, то отримуємо включення  $[[A, G], G] \leq C_A(G)$ . Таким чином,  $G$  діє тотожно на факторах ряду  $\langle 0 \rangle \leq C_A(G) \leq [A, G] \leq A$ , а це тягне за собою нільпотентність групи  $G/C_G(A)$ , і тепер можна застосувати теорему 1.

Цікавим є той факт, що автору роботи [14] вдалося отримати ці слабкіші результати, майже дослівно повторюючи аргументи доведень нашої препублікації [15], яка з'явилася раніше.

Другим є випадок, коли  $G \neq \text{Coc}_{\mathbb{Z}-\text{mmx}}(G)$  і група  $G$  не є скінченно породженою. Його описує така теорема.

**Теорема 2.** *Нехай  $G$  — локально узагальнено радикальна група,  $A$  — мінімаксно-антифінітарний  $\mathbb{Z}G$ -модуль та  $D = \text{Coc}_{\mathbb{Z}-\text{mmx}}(G)$ . Припустимо, що  $G$  не є скінченно породженою,  $G \neq D$  та  $C_G(A) = \langle 1 \rangle$ . Тоді  $G$  є групою одного з таких типів:*

(1)  $G$  – квазіциклічна  $q$ -група для деякого простого числа  $q$ .

(2)  $G = Q \times \langle g \rangle$ , де  $Q$  є квазіциклічною  $q$ -підгрупою,  $g$  –  $p$ -елемент та  $g^p \in D$ ,  $p, q$  – прості числа (не обов'язково різні).

(3)  $G$  містить у собі таку нормальну подільну черніковську  $q$ -підгрупу  $Q$ , що  $G = Q\langle g \rangle$ , де  $g$  –  $p$ -елемент,  $p, q$  – прості числа (не обов'язково різні).

Більш того,  $G$  задовольняє такі умови:

(3a)  $g^p \in D$ ;

(3b)  $Q$  є  $G$ -квазіскінченною;

(3c) якщо  $q = p$ , то  $Q$  має спеціальний ранг  $p^{m-1}(p-1)$ , де  $p^m = |\langle g \rangle / C_{\langle g \rangle}(Q)|$ ;

(3d) якщо  $q \neq p$ , то  $Q$  має спеціальний ранг  $o(q, p^m)$ , де знову  $p^m = |\langle g \rangle / C_{\langle g \rangle}(Q)|$  та  $o(q, p^m)$  – порядок  $q$  за модулем  $p^m$ .

Також для типів (2), (3)  $A(\omega\mathbb{Z}D)$  є черніковською та  $\Pi(A(\omega\mathbb{Z}D)) \subseteq \Pi(D)$ .

Тут через  $\omega RG$  позначено фундаментальний ідеал групового кільця  $RG$ , тобто двосторонній ідеал  $RG$ , породжений елементами  $g-1$ , де  $g \in G$ .

Також нагадаємо, що нормальна абелева підгрупа  $A$  групи  $G$  називається  $G$ -квазіскінченною, якщо кожна власна  $G$ -інваріантна підгрупа  $A$  є скінченною.

Нарешті, третім є випадок, коли  $G \neq \text{Coc}_{\mathbb{Z}-\text{mmx}}(G)$  і група  $G$  скінченно породжена. Його описує така теорема.

**Теорема 3.** Нехай  $G$  – скінченно породжена узагальнено радикальна група,  $A$  – мінімаксно-антифінитарний  $\mathbb{Z}G$ -модуль та  $D = \text{Coc}_{\mathbb{Z}-\text{mmx}}(G)$ . Припустимо, що  $G \neq D$  та  $C_G(A) = \langle 1 \rangle$ . Тоді  $G$  задовольняє такі умови:

1)  $D$  містить у собі таку нормальну в  $G$  нільпотентну підгрупу  $K$ , що  $G/K$  – майже поліциклічна група;

2)  $G/D$  є вільною від скруту;

3)  $K$  задовольняє умову максимальності для  $\langle g \rangle$ -інваріантних підгруп для будь-якого елемента  $g$ , що не міститься в  $D$ .

1. Hall P. Finiteness conditions for soluble groups // Proc. London Math. Soc. – 1954. – 4. – P. 419–436.
2. Hall P. On the finiteness of certain soluble groups // Ibid. – 1959. – 9. – P. 595–632.
3. Kurdachenko L. A., Otal J., Subbotin I. Ya. Artinian modules over group rings. – Basel: Birkhäuser, 2007. – 248 p.
4. Phillips R. Finitary linear groups: a survey // Finite and locally finite groups / NATO ASI. Ser. C 471. – Dordrecht: Kluwer, 1995. – P. 111–146.
5. Wehrfritz B. A. F. Finite-finitary groups of automorphisms // J. Algebra and Its Appl. – 2002. – 4. – P. 375–389.
6. Wehrfritz B. A. F. Finitary automorphism groups over commutative rings // J. Pure Appl. Algebra. – 2002. – 172. – P. 337–346.
7. Wehrfritz B. A. F. Finitary and artinian-finitary groups over the integers  $\mathbb{Z}$  // Ukr. Math. J. – 2002. – 54. – P. 924–936.
8. Wehrfritz B. A. F. Finitary and artinian-finitary groups over commutative rings // J. Group Theory. – 2004. – 7. – P. 243–253.
9. Wehrfritz B. A. F. On generalized finitary groups // J. Algebra. – 2002. – 247. – P. 707–727.
10. Wehrfritz B. A. F. Artinian-finitary groups over commutative rings and non-commutative rings // J. London Math. Soc. – 2004. – 70. – P. 325–340.
11. Wehrfritz B. A. F. Artinian-finitary groups are locally normal-finitary // J. Algebra. – 2005. – 287. – P. 417–431.
12. Kurdachenko L. A., Subbotin I. Ya., Chupordya V. A. On bounded artinian finitary modules // Int. J. Algebra and Computation. – 2007. – 17, No 4. – P. 881–893.
13. Kurdachenko L. A., Munoz-Escolano J. M., Otal J. Antifinitary linear groups // Forum Math. – 2008. – 20. – P. 27–44.



14. *Dashkova O. Yu.* On modules over group rings of groups with restriction on the system of all proper subgroups // arXiv:1305.0744v2.
15. *Kurdachenko L. A., Subbotin I. Ya., Chupordya V. A.* On the structure of some modules over generalized soluble groups // arXiv:1302.2115.

Дніпропетровський національний університет  
ім. Олеся Гончара  
Національний університет Лос-Анджелеса, США

Надійшло до редакції 13.11.2013

**Л. А. Курдаченко, И. Я. Субботин, В. А. Чупордя**

### **О структуре модулей над обобщенно разрешимыми группами**

*Пусть  $R$  — кольцо,  $G$  — группа. Модуль  $A$  над групповым кольцом  $RG$  будем называть минимаксно-антифинитарным  $RG$ -модулем, если фактор-модуль  $A/C_A(H)$  является минимаксным как  $R$ -модуль для произвольной собственной подгруппы  $H$ , которая не является конечно порожденной, но  $R$ -модуль  $A/C_A(G)$  не является минимаксным. Исследуются минимаксно-антифинитарные модули над целочисленными групповыми кольцами локально обобщенно радикальных групп.*

**L. A. Kurdachenko, I. Ya. Subbotin, V. A. Chupordya**

### **On the structure of some modules over generalized soluble groups**

*Let  $R$  be a ring,  $G$  be a group, and  $A$  be an  $RG$ -module. We say that  $A$  is a minimax-antifinitary  $RG$ -module if the factor-module  $A/C_A(H)$  is minimax as an  $R$ -module for each not finitely generated proper subgroup  $H$ , and the  $R$ -module  $A/C_A(G)$  is not minimax. The minimax-antifinitary modules over the group ring  $RG$ , where  $R = \mathbb{Z}$  is the ring of all integers and  $G$  is the locally generalized radical group, are studied.*



УДК 004.352

Член-кореспондент НАН України **В. В. Грицик, А. Б. Бондарук,  
В. В. Грицик, І. І. Кравець, Ю. В. Опотяк, І. Г. Цмоць**

### **Інформаційна технологія програмно-керованих растрів введення зображень у системах комп'ютерного зору**

*Розроблено інформаційну технологію програмно-керованих растрів введення зображень у системах комп'ютерного зору. Визначено принципи побудови та створено систему введення зображень з високою роздільною здатністю та чутливістю для клітинної мікроскопії. Запропоновано нестандартні програмно-апаратні методи формування розгортки, які забезпечили можливість введення окремих фрагментів сцени у полі зору та зменшили необхідний обсяг даних.*

Однією з актуальних задач розвитку інформаційних технологій є забезпечення введення зображень у системах комп'ютерного зору з високою роздільною здатністю в умовах низької інтенсивності сигналів для їх подальшої обробки, класифікації та розпізнавання. Для розв'язання цієї задачі необхідно розробити ефективні за критерієм ціна — роздільна здатність і чутливість системи введення зображень.

У системах введення в комп'ютер зображень на пристроях з зарядовим зв'язком (ПЗЗ) зображення проектується на світлочутливу матрицю і оцифровується шляхом комутації кожного елемента матриці на вхід аналого-цифрового перетворювача (АЦП). Найкращі технічні характеристики таких систем досягнуті в цифровій фотографії. Істотним обмеженням цих засобів є їх матрична структура, яка є фіксованою для даного типу пристрою і не допускає збільшення кількості світлочутливих елементів, а отже, і підвищення роздільної здатності.

На відміну від ПЗЗ, приймальні мішені електронно-променевих трубок є до певного ступеня однорідними. Пристрої введення зображень на основі мішені електронно-променевих трубок використовуються, в основному, для створення телевізійних камер різного призначення.

Завдяки однорідності та неперервності світлочутливої мішені електронно-променевої трубки та технологічного запасу за параметрами існує можливість реалізації сканування цієї мішені, що забезпечує отримання підвищеної роздільної здатності системи. Ці особливості стали базою для розробки технології програмно-керованих растрів, яка полягає

---

© В. В. Грицик, А. Б. Бондарук, В. В. Грицик, І. І. Кравець, Ю. В. Опотяк, І. Г. Цмоць, 2014

в програмно-апаратному формуванні растрових розгортки вздовж площини досліджуваної поверхні і вимірюванні інтенсивності в кожній точці цієї поверхні.

Отже, актуальною проблемою є створення ефективних за критерієм ціна — роздільна здатність і чутливість систем введення зображень, що можливе при інтегрованому підході, який охоплює апаратні, алгоритмічні і програмні засоби та сучасну елементну базу. Зменшення енергоспоживання та габаритів системи вводу та обробки зображень досягається при їх реалізації на базі надвеликих інтегральних схем (НВІС).

**Принципи інформаційної технології програмно-керованих растрів для введення зображень.** Технологія програмно-керованих растрів полягає в програмно-апаратному формуванні растрової розгортки вздовж площини світлочутливої матриці і вимірюванні в кожній точці цієї поверхні величини заряду, що відповідає інтенсивності її освітлення.

Введення зображення за такою технологією відбувається таким чином. При закритому модуляторі трубки виконується прицілювання електронної гармати у визначене місце на мішені приймальної трубки. Прицілювання відбувається подачею відповідних напруг двома цифро-аналоговими перетворювачами (ЦАП) на відхиляючу систему трубки шляхом формування їх програмно-апаратними засобами. Після прицілювання відкривається на деякий час модулятор трубки. Порція електронного променя потрапляє у відповідне місце на мішені трубки, таким чином здійснюючи імпульсну комутацію. Формується відеоімпульс, який через попередній підсилювач потрапляє на вхід пікового АЦП. Він виконує оцифровування амплітуди відеоімпульсу (отримання пікселя). Для одержання наступного пікселя весь алгоритм повторюється з новими значеннями його координат. Після проходження заданої кількості точок забезпечується формування матриці пікселів зображення.

Слід зазначити, що такий підхід, крім загальнозвичиваної постріркової розгортки, відкриває можливість формування растрів різноманітної конфігурації, адаптованих до особливостей спостереження. Наприклад, у полі зору системи введення змінюється тільки окремий елемент (елементи) сцени, відповідно, забезпечується сканування у межах цього фрагменту і, як наслідок, зменшення кількості інформації, необхідної для введення у систему.

Застосування імпульсної комутації мішені та програмно-апаратного формування розгортки з малим кроком дозволяє значно підвищити роздільну здатність оцифровування за координатами пікселя за рахунок перекриття зон комутації як в межах одного пікселя стрічки, так і між стрічками. Такий підхід дозволяє зчитувати інформацію з мішені площиною, значно меншою за площину електронного променя, який зчитує інформацію, що забезпечує отримання додаткових даних для підвищення роздільної здатності (рис. 1).

В основу інформаційної технології програмно-керованих растрів для введення зображень покладено низку принципів. Принцип модульності, який полягає у реалізації основних програмно-апаратних компонентів інформаційної технології у вигляді функціонально завершених пристроїв (модулів), що мають вихід на стандартний інтерфейс. Модульний підхід при проектуванні системи вводу зображень сприяє стандартизації елементів, скороченню витрат на проектування та відсуває час морального старіння технічних засобів. Структура апаратних модулів повинна бути орієнтована на застосування НВІС. Впровадження НВІС має сприяти зменшенню габаритів, маси, споживання, а також збільшенню надійності та швидкодії системи шляхом перекладання на апаратну частину функцій програмних засобів, які найширше використовуються та є найважливішими. Апаратна реалізація таких функцій спрощується при реалізації їх на модулях з процесорною реалізацією, яка передбачає наявність пристроїв обробки, зберігання, управління та обміну. При цьому

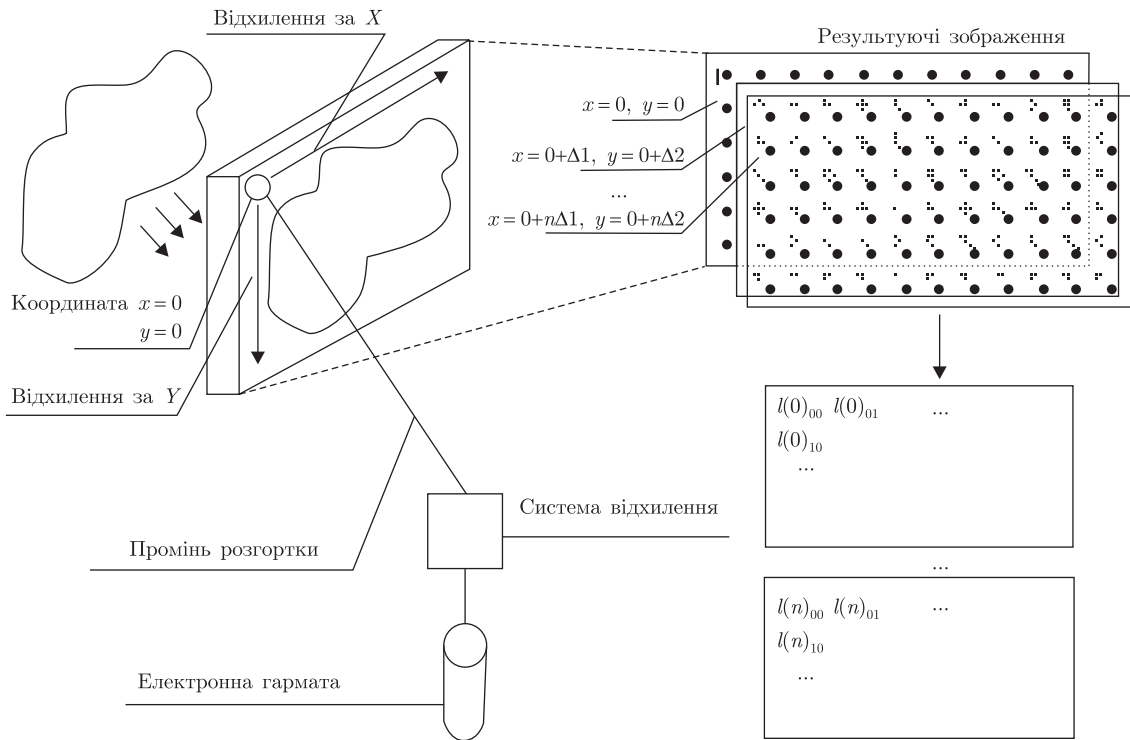


Рис. 1. Введення зображення за технологією програмно-керованого растру

на програмну частину покладаються функції керування та забезпечення взаємодії модулів системи комп'ютерного зору.

Принцип змінного складу обладнання передбачає наявність ядра системи комп'ютерного зору та змінних модулів, за допомогою яких система адаптується до вводу зображень різної природи.

Принцип відкритості програмного забезпечення системи передбачає створення системного та прикладного програмного забезпечення з максимальним використанням стандартних драйверів та програмних засобів та врахуванням можливості нарощування та вдосконалення.

Таким чином, технологія програмно-керованих растрів дозволяє створити високоефективну систему введення зображень з високими метрологічними характеристиками.

**Реалізація системи введення зображень з високою роздільною здатністю з використанням технології програмно-керованих растрів.** Основою системи є ядро та набір змінних модулів, які приєднуються до ядра системи залежно від вимог застосування. Ядро системи є постійним для всіх застосувань і має можливість розширення. Ядро системи складається з таких модулів: модуля оцифровування відеозображення, модуля цифро-аналогового формування розгортки та модуля управління.

Розглянемо реалізовану за вказаними принципами систему введення зображень для клітинної мікроскопії. Особливістю системи є застосування в якості фотоелектронного перетворювача дисектора для забезпечення високої чутливості (рис. 2).

Архітектура експериментального пристрою відбору зображень забезпечує специфічне керування, відбір, перетворення, передачу зображення в комп'ютер та формування необхідних режимів роботи дисектора ЛІИ-604 К. Система складається з таких вузлів:

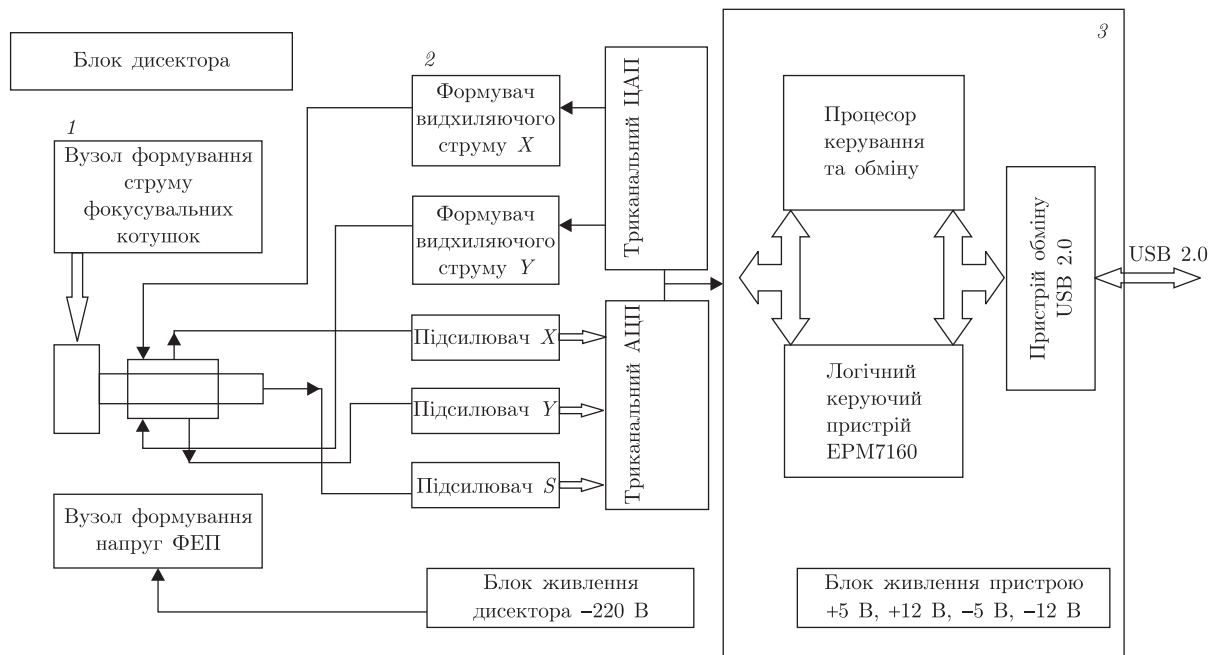


Рис. 2. Структура системи введення зображень з високою роздільною здатністю

функціонального блока фотоелектронного перетворювача, в якому розміщено дисектор ЛШ-604 К з відхиляючими та фокусувальними котушками, вузол формування струму фокусувальних котушок і вузол формування напруг ФЕП дисектора;

функціонального блока з підсилювачами сигналу дисектора та сигналів, пропорційних струму у відхиляючих котушках, формувачами відхиляючих струмів за координатами  $X$  і  $Y$ , трьох 12-розрядних цифро-аналогових перетворювачів формування відхиляючих сигналів за координатами  $X$ ,  $Y$  і фокусувального сигналу та триканального 14-розрядного аналого-цифрового перетворювача;

функціонального блока з процесором керування, логічним керуючим пристроєм та пристроєм обміну інформацією з комп'ютером і блоком живлення інтерфейсних схем;

функціонального блока високовольного живлення дисектора.

Вихідний сигнал з дисектора, який містить інформацію про вхідне зображення, подається на вхід підсилювача і далі для оцифрування на АЦП. Через кола логічного керуючого пристрою після попереднього опрацювання дані з АЦП надходять через пристрій обміну та інтерфейс USB2.0 у комп'ютер для подальшого опрацювання та формування зображення. Необхідні дані для формування заданого типу розгортки завантажуються з комп'ютера. Процесор керування та обміну, логічний керуючий пристрій та ЦАП забезпечують формування сигналів розгортки  $X$ ,  $Y$  та струму фокусувальних котушок. Блок живлення дисектора забезпечує формування напруги 2 кВ для фокусування та формування напруг електронного помножувача дисектора.

Таким чином, розроблено технологію програмно-керованих растрів, яка полягає у програмно-апаратному формуванні розгортки та періоду зчитування, що забезпечує більш детальне сканування мішені приймаючого фотоелектронного перетворювача і, як наслідок, підвищення роздільної здатності зображень статичної сцени.

Використання нестандартних методів розгортки на основі технології програмно-керованих растрів забезпечує можливість введення окремих фрагментів сцени у полі зору і, відповідно, зменшення необхідного обсягу даних.

Використано інтегрований підхід до побудови системи введення зображень на основі технології програмно-керованих растрів, який завдяки поєднанню апаратних, алгоритмічних і програмних засобів забезпечує підвищення роздільної здатності та чутливості системи.

1. *Форсайт Д., Понс Ж.* Компьютерное зрение. Современный подход. – Москва; Санкт-Петербург; Киев, 2004. – 925 с.
2. *Гонсалес Р., Вудс Р.* Цифровая обработка изображений. – Москва: Техносфера, 2006. – 1072 с.
3. *Сліпченко М. І., Руденко О. Г., Сотников О. М. та ін.* Проблемно-орієнтовані і спеціалізовані обчислювальні засоби високої продуктивності: створення і застосування / Під ред. М. Ф. Бондаренка. – Харків: ХНУРЕ, 2011. – 492 с.
4. *Грицьк В. В., Кравець І. І., Опомяк Ю. В., Цмоць І. Г.* Апаратні засоби системи вводу зображень з високою роздільною здатністю // Інформаційні технології і системи. – 2005. – 8, № 1. – С. 123–135.
5. *Грицьк В. В., Опомяк Ю. В., Цмоць І. Г.* Інтегрований підхід до розробки високоєфективних апаратних засобів інформаційних технологій обробки сигналів реального часу. Системні технології // Регіон. міжвуз. зб. наук. праць. – Дніпропетровськ, 2006. – Вип. 6(47). – С. 84–95.

НУ “Львівська політехніка”  
Тернопільський національний технічний університет  
ДП “Львівський науково-дослідний радіотехнічний  
інститут”

Надійшло до редакції 12.11.2013

Член-корреспондент НАН України **В. В. Грицьк, А. Б. Бондарук,  
В. В. Грицьк, І. І. Кравець, Ю. В. Опомяк, І. Г. Цмоць**

### **Информационная технология программно-управляемых растров ввода изображений в системах компьютерного зрения**

*Разработана информационная технология программно-управляемых растров ввода изображений в системах компьютерного зрения. Определены принципы построения и создана система ввода изображений с высоким разрешением и чувствительностью для клеточной микроскопии. Предложены нестандартные программно-аппаратные методы формирования развертки, которые обеспечили возможность ввода отдельных фрагментов сцены в поле зрения и уменьшили необходимый объем данных.*

Corresponding Member of the NAS of Ukraine **V. V. Grytsyk, A. B. Bondaruk,  
V. V. Grytsyk, I. I. Kravets, Yu. V. Opotyak, I. G. Tsmots**

### **Information technology of software-controlled rasters for the image acquiring for computer vision systems**

*The information technology of program-controlled rasters for the image acquiring in computer vision systems is developed. The principles are defined, and the system of capturing images with high resolution and sensitivity for cell microscopy is created. Non-standard hardware and software methods for forming rasters that allow one to introduce individual fragments of scenes in the field of view and to reduce the required amount of data are proposed.*

С. В. Сирик, Н. Н. Сальников

## О применении сосредоточения в методе конечных элементов Петрова–Галеркина при решении задач конвекции-диффузии

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины В. Ф. Губаревым)

*Рассмотрены вопросы противодействия дисперсионным и диссипативным эффектам, возникающим после применения сосредоточения в конечноэлементном методе Петрова–Галеркина при решении задач конвекции-диффузии. Обобщены некоторые результаты в данной области, полученные ранее, и проведено сравнение с другими существующими подходами. Теоретические результаты исследования подтверждаются расчетными данными.*

Метод Петрова–Галеркина (МПГ) [1–3] в форме метода конечных элементов (МКЭ) [4] считается одним из наиболее успешных подходов к построению устойчивых численных аппроксимаций в задачах моделирования процессов конвекции-диффузии [1, 2]. При пространственной аппроксимации МПГ нестационарного параболического уравнения конвективно-диффузионного типа получаем *полудискретную аппроксимацию* [1, 2, 8] — систему обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ) вида  $M\dot{\vec{a}} = \vec{F}(t, \vec{a})$ , где  $\vec{a}(t)$  — вектор коэффициентов разложения искомого решения по базисным функциям МКЭ;  $\vec{F}$  — некоторая вектор-функция (в общем случае, нелинейная);  $M$  — так называемая *матрица масс* [1, 2, 4], которая, в общем случае, является недиагональной, несимметричной и разреженной. При последующем переходе от СОДУ к разностным схемам из-за недиагональности  $M$  схемы получаются неявными. Кроме того, при некоторых постановках задач матрица  $M$  оказывается зависимой от времени [1–3, 7], что может приводить к ситуациям, когда на каждом шаге интегрирования СОДУ приходится обращаться  $M$  (или выполнять какую-либо ее факторизацию). Это требует значительных вычислительных затрат. Для устранения указанных трудностей в вычислительной практике часто используют так называемый прием *сосредоточения* (mass lumping) [1, 4, 5], суть которого заключается в замене  $M$  диагональной матрицей  $\bar{M}$ , в которой элементы диагонали являются суммами элементов соответствующих строк матрицы  $M$ . В результате, после выполнения указанной операции, получаем систему  $\bar{M}\dot{\vec{a}} = \vec{F}(t, \vec{a})$  (будем в дальнейшем называть ее *сосредоточенной аппроксимацией* [7]). Использование сосредоточения позволяет в схемах МКЭ трактовать частную производную по времени таким же образом, как это делается в методах конечных разностей. Понятно, что после проведения указанной диагонализации матрицы  $M$  отпадает необходимость в выполнении трудоемких операций по ее обращению. Однако можно показать (см. [6–8]), что применение сосредоточения в ряде случаев вносит в численную схему дисперсионную и диссипативную ошибки и приводит к возникновению больших погрешностей (достаточно подробный обзор работ “за” и “против” использования сосредоточения в численных аппроксимациях приводится в [6]). Это является существенным недостатком приема сосредоточения, изучению и преодолению которого посвящены работы [7, 8]. Подход работы [7] основан

на том, чтобы с помощью соответствующего выбора управляющих параметров МПГ сделать решение сосредоточенной аппроксимации МПГ близким (в некотором смысле) к решению исходной (“несосредоточенной”) аппроксимации МПГ. Для этого сравниваются погрешности исходной и сосредоточенной аппроксимаций МПГ на решении дифференциального уравнения. Отметим, что в работе [7] рассматривался случай применения МПГ (и построения соответствующих полудискретных и дискретных аппроксимаций) к достаточно общему уравнению конвекции-диффузии с переменными коэффициентами. Подход работы [8] основан на использовании матричных рядов для аппроксимации  $M^{-1}$ : для этого  $M$  представляется в виде  $M = \bar{M}(I - A)$  (где  $I$  — единичная матрица,  $A \equiv \bar{M}^{-1}(\bar{M} - M)$ ), откуда  $M^{-1} = (I + A + A^2 + \dots)\bar{M}^{-1}$  (ряд Неймана). В [8] авторы отмечают, что уже использование  $(I + A)\bar{M}^{-1}$  вместо  $M^{-1}$  способно значительно улучшить точность численного решения (однако не приводят никаких теоретических оценок качества и точности решения в зависимости от взятого числа членов матричного ряда). Заметим, что (в отличие от [7]) в работе [8] рассматривалось только уравнение переноса с постоянными коэффициентами, а основное внимание уделено полудискретным аппроксимациям Галеркина (и сходимость соответствующих матричных рядов Неймана доказана только для классического МКЭ Галеркина с линейными элементами). В данной работе результаты [7] обобщены и показано, что в некоторых случаях подходы работ [7] и [8] приводят к одинаковым вычислительным схемам.

**Уравнение конвекции-диффузии и его аппроксимации МПГ.** Рассмотрим одномерное нестационарное уравнение конвекции-диффузии [1, 2]

$$Lu \equiv \frac{\partial u}{\partial t} + \lambda \frac{\partial u}{\partial x} - \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad (1)$$

где коэффициенты  $\lambda = \lambda(t)$  и  $\kappa = \kappa(t)$  заданы, а  $u = u(x, t)$  — неизвестное решение. Используя в МПГ стандартные кусочно-линейные базисные и кусочно-квадратичные весовые функции [7, 1–3], для (1) получаем СОДУ,  $i$ -е уравнение (соответствующее узлу  $x_i$ ) которой имеет вид [7, 1]

$$\begin{aligned} & \left( \frac{1}{6} + \frac{\alpha_i}{4} \right) \frac{da_{i-1}}{dt} + \frac{2}{3} \frac{da_i}{dt} + \left( \frac{1}{6} - \frac{\alpha_i}{4} \right) \frac{da_{i+1}}{dt} + \lambda \frac{a_{i+1} - a_{i-1}}{2h} - \\ & - \left( \kappa + \frac{\alpha_i \lambda h}{2} \right) \frac{a_{i-1} - 2a_i + a_{i+1}}{h^2} = 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\vec{a} = \{a_i(t)\}$  — коэффициенты разложения приближенного решения по соответствующим базисным функциям;  $\{\alpha_i\}$  — стабилизационные коэффициенты [1, 2, 7];  $h$  — шаг сетки (для упрощения выкладок сетка предполагается равномерной). При всех  $\alpha_i = 0$ , по определению, получаем классический МКЭ Галеркина. Вопросы учета начальных и граничных условий начально-краевых задач подробно освещены в [1–3]. Применяя к уравнению (2) сосредоточение относительно производных по времени, получаем следующее соотношение:

$$\frac{da_i^{(l)}}{dt} + \lambda \frac{a_{i+1}^{(l)} - a_{i-1}^{(l)}}{2h} - \left( \kappa + \frac{\alpha_i^{(l)} \lambda h}{2} \right) \frac{a_{i-1}^{(l)} - 2a_i^{(l)} + a_{i+1}^{(l)}}{h^2} = 0 \quad (3)$$

(здесь верхние индексы  $(l)$  введены для того, чтобы отличать величины от соответствующих величин из соотношения (2)).

**Получение основных уравнений.** Найдем связь между коэффициентами  $\alpha_i$  и  $\alpha_i^{(l)}$  соотношений (2), (3) (данный подход к исследованию сосредоточенных аппроксимаций был



предложен и развит в работе [7], см. там более подробное обсуждение его аспектов). Обозначим через  $L_h$  и  $L_h^{(l)}$  дифференциально-разностные операторы соотношений (2) и (3) соответственно. Приравнявая теперь погрешности  $\psi \equiv L_h u - Lu$  и  $\psi^{(l)} \equiv L_h^{(l)} u - Lu$  аппроксимации (в точке  $(x_i, t)$ ) операторами  $L_h$  и  $L_h^{(l)}$  дифференциального оператора  $L$  уравнения (1) на его решении  $u(x, t)$ , получаем (тут  $u_i \equiv u(x_i, t)$ ):

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{6} + \frac{\alpha_i}{4}\right) \frac{du_{i-1}}{dt} - \frac{1}{3} \frac{du_i}{dt} + \left(\frac{1}{6} - \frac{\alpha_i}{4}\right) \frac{du_{i+1}}{dt} - \frac{\alpha_i \lambda h}{2} \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} = \\ & = -\frac{\alpha_i^{(l)} \lambda h}{2} \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2}. \end{aligned}$$

Выразив из данного равенства значение  $\alpha_i^{(l)}$  и подставив в  $(L_h^{(l)} u)(x_i, t)$ , находим

$$\begin{aligned} (L_h^{(l)} u)(x_i, t) &= \dot{u}_i + \lambda \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} - \left(\kappa + \frac{\alpha_i \lambda h}{2}\right) \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + \\ &+ \frac{h^2}{6} \frac{\dot{u}_{i+1} - 2\dot{u}_i + \dot{u}_{i-1}}{h^2} - \frac{\alpha_i h}{2} \frac{\dot{u}_{i+1} - \dot{u}_{i-1}}{2h}. \end{aligned} \quad (4)$$

Раскладывая в ряды Тейлора и используя (1) для выражения частной производной по времени, преобразуем в (4) последние два слагаемых  $\left(\frac{\partial^j u_i}{\partial x^j} \equiv \frac{\partial^j u}{\partial x^j} \Big|_{x=x_i}\right)$ :

$$\begin{aligned} \frac{\dot{u}_{i+1} - \dot{u}_{i-1}}{2h} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right) \Big|_{x=x_i} + \frac{h^2}{6} \frac{\partial^3}{\partial x^3} \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right) \Big|_{x=x_i} + O(h^4) = \\ &= -\lambda \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} + \kappa \frac{\partial^3 u_i}{\partial x^3} - \frac{\lambda h^2}{6} \frac{\partial^4 u_i}{\partial x^4} + \frac{\kappa h^2}{6} \frac{\partial^5 u_i}{\partial x^5} + O(h^4), \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\dot{u}_{i+1} - 2\dot{u}_i + \dot{u}_{i-1}}{h^2} &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right) \Big|_{x=x_i} + \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right) \Big|_{x=x_i} + O(h^4) = \\ &= -\lambda \frac{\partial^3 u_i}{\partial x^3} + \kappa \frac{\partial^4 u_i}{\partial x^4} - \frac{\lambda h^2}{12} \frac{\partial^5 u_i}{\partial x^5} + \frac{\kappa h^2}{12} \frac{\partial^6 u_i}{\partial x^6} + O(h^4). \end{aligned} \quad (6)$$

Подставляя (5), (6) в (4) и учитывая, что

$$\frac{\alpha_i \lambda h}{2} \left(\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} - \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2}\right) = \frac{\alpha_i h^3 \lambda}{24} \frac{\partial^4 u_i}{\partial x^4} + O(h^5),$$

получаем

$$\begin{aligned} (L_h^{(l)} u)(x_i, t) &= \dot{u}_i + \lambda \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} - \kappa \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} - \left(\frac{\kappa \alpha_i h}{2} + \frac{\lambda h^2}{6}\right) \frac{\partial^3 u_i}{\partial x^3} + \\ &+ \left(\frac{\alpha_i \lambda h^3}{24} + \frac{\kappa h^2}{6}\right) \frac{\partial^4 u_i}{\partial x^4} - \left(\frac{\alpha_i \kappa h^3}{12} + \frac{\lambda h^4}{72}\right) \frac{\partial^5 u_i}{\partial x^5} + \frac{\kappa h^4}{72} \frac{\partial^6 u_i}{\partial x^6} + O(h^5). \end{aligned} \quad (7)$$

Для упрощения записей при проведении выкладок введем следующие сокращенные обозначения (стандартные в теории разностных схем, см. [9]) для выражения разностных соотношений:  $u_{\bar{x},i} \equiv (u_i - u_{i-1})/h$ ,  $u_{x,i} \equiv (u_{i+1} - u_i)/h$ ,  $u_{\dot{x},i} \equiv (u_{i+1} - u_{i-1})/(2h)$ ,  $u_{\bar{x}\bar{x},i} \equiv (u_{\bar{x}})_{x,i} = (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1})/h^2$ . Поскольку

$$\frac{\partial^3 u_i}{\partial x^3} = u_{\bar{x}\dot{x}\bar{x},i} - \frac{h^2}{4} \frac{\partial^5 u_i}{\partial x^5} + O(h^4), \quad \frac{\partial^4 u_i}{\partial x^4} = u_{\bar{x}\bar{x}\bar{x},i} - \frac{h^2}{6} \frac{\partial^6 u_i}{\partial x^6} + O(h^4),$$

$$u_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x},i} = \frac{\partial^5 u_i}{\partial x^5} + O(h^2), \quad u_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x},i} = \frac{\partial^6 u_i}{\partial x^6} + O(h^2),$$

то  $(L_h^{(l)} u)(x_i, t)$  из соотношения (7) можно представить в виде

$$\dot{u}_i + \lambda u_{\bar{x},i} - \kappa u_{\bar{x}x,i} - \theta_3 u_{\bar{x}\bar{x},i} - \mu_4 u_{\bar{x}\bar{x}\bar{x},i} - \theta_5 u_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x},i} - \mu_6 u_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x},i} + O(h^5), \quad (8)$$

где коэффициенты  $\theta_3, \theta_5, \mu_4, \mu_6$  определяются следующими выражениями:

$$\theta_3 \equiv \frac{\kappa \alpha_i h}{2} + \frac{\lambda h^2}{6}, \quad \mu_4 \equiv -\left(\frac{\alpha_i \lambda h^3}{24} + \frac{\kappa h^2}{6}\right), \quad \theta_5 \equiv -\left(\frac{\alpha_i \kappa h^3}{24} + \frac{\lambda h^4}{36}\right), \quad \mu_6 \equiv \frac{\kappa h^4}{72}.$$

Отметим, что в случае, когда  $\alpha_i = O(h)$ , последний член в (7) и (8) будет величиной  $O(h^6)$  (это следует из процесса вывода соотношений (7) и (8)). Отбрасывая в (8) этот последний член, получаем следующую полудискретную аппроксимацию для нахождения коэффициентов  $\{a_i(t)\}$ :

$$\dot{a}_i + \lambda a_{\bar{x},i} = \kappa a_{\bar{x}x,i} + \theta_3 a_{\bar{x}\bar{x},i} + \mu_4 a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x},i} + \theta_5 a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x},i} + \mu_6 a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x},i}. \quad (9)$$

**Сравнение с подходом работы [8].** Отметим, что частный случай соотношения (9), уравнение

$$\dot{a}_i + \lambda a_{\bar{x},i} = \kappa a_{\bar{x}x,i} + \theta_3 a_{\bar{x}\bar{x},i} - (\kappa h^2/6) a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x},i}, \quad (10)$$

был получен и исследован в работе [7]. Непосредственным подсчетом можно убедиться, что к (10) (при всех  $\alpha_i = 0$ ) также приводит подход работы [8], если  $M^{-1}$  аппроксимировать выражением  $(I + A)\bar{M}^{-1}$ . Действительно, из уравнений (2), (3) следует, что  $i$ -е уравнение соответствующей системы записывается в форме  $\dot{a}_i + \sum_{j=i-1}^{i+1} d_j \{\lambda(a_{j+1} - a_{j-1})/2 - \kappa(a_{j+1} - 2a_j + a_{j-1})/h\}/h = 0$  (где  $d_i = 4/3, d_{i\pm 1} = -1/6$ ), которая элементарными преобразованиями приводится к (10).

Рассмотрим теперь подход работы [8] в случае, когда матрица  $M^{-1}$  аппроксимируется выражением  $(I + A + A^2)\bar{M}^{-1}$ . Тогда, как прежде, непосредственным подсчетом убеждаемся, что  $i$ -е уравнение полудискретной аппроксимации будет иметь вид  $\dot{a}_i + \sum_{j=i-2}^{i+2} \tilde{d}_j \{\lambda(a_{j+1} - a_{j-1})/2 - \kappa(a_{j+1} - 2a_j + a_{j-1})/h\}/h = 0$  (где  $\tilde{d}_i = 3/2, \tilde{d}_{i\pm 1} = -5/18, \tilde{d}_{i\pm 2} = 1/36$ ), который элементарными преобразованиями приводится к виду (9), где значения  $\theta_3, \theta_5, \mu_4$  равны прежним значениям соответствующих параметров, а  $\mu_6 = \kappa h^4/36$ . Приведенные ниже расчеты свидетельствуют, что данная численная схема, в сравнении с оригинальной схемой (9), дает худшие результаты. При  $\kappa = 0$ , когда имеем чисто конвекционный процесс переноса (а в [8] рассматривался только этот случай), данная схема полностью совпадает с (9). Отметим, что для аппроксимации производных в (7) (и, соответственно, получения (9)) были использованы центрально-разностные формулы (повышенного порядка точности). Выбрав же для аппроксимации производных в (7) другие разностные соотношения, мы получили бы другие вычислительные схемы, отличающиеся от (9) и, соответственно, от схем работы [8]. Поэтому, в этом смысле, подход, использованный и развиваемый в данной работе, предоставляет большую свободу действий по сравнению с подходом работы [8].

**Численный пример.** Рассмотрим задачу для уравнения (1) с известным аналитическим решением  $u(x, t) = \exp\left(-\frac{(x + 3/5 - (t + 1))^2}{4\kappa(t + 1)}\right)/2\sqrt{\pi\kappa(t + 1)}$ ,  $\lambda(t) = 1$ ,  $\kappa = 10^{-3}$  на отрезке  $[0; 1]$  (см. [7]). Количество узлов равно 100, все  $\alpha_i = 0$ . Для оценки уклонения численного решения  $\tilde{u}$  от аналитического  $u$  используем величину  $\text{err}_{\max} = \max_i |\tilde{u}(x_i, t) - u(x_i, t)|$ . Тогда при  $t = 0,35$  расчет с помощью системы (2) дает  $\text{err}_{\max} \approx 0,0098$ , а с помощью (3) —  $\text{err}_{\max} \approx 0,4653$  (как видим, применение сосредоточения резко увеличивает погрешность). Расчет с помощью системы (10) дает  $\text{err}_{\max} \approx 0,017$ , а с помощью системы (9) —  $\text{err}_{\max} \approx 0,0097$ , откуда видим, что учет дополнительных разностных членов  $a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x},i}$  и  $a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x},i}$  в (9) (по сравнению с (10)) значительно увеличивает точность численного решения. Расчет с помощью соотношений (9), где  $\mu_6$  положено равным  $\kappa h^4/36$ , дает  $\text{err}_{\max} \approx 0,01$ . Для интегрирования СОДУ был использован явный адаптивный метод 3-го порядка из работы [10] (с начальным шагом по времени  $\tau = 10^{-4}$  и соответствующими настройками точности).

**Разностные схемы.** Пусть по временной переменной  $t$  введена сетка с шагом  $\tau$  и узлами  $t_n = n\tau$ . Для любой функции  $c(x, t)$  обозначим  $c_i^n \equiv c(x_i, t_n)$  (или просто  $c$ , когда ясно, что речь идет о значении в текущем узле  $(x_i, t_n)$  сетки),  $\hat{c} \equiv c_i^{n+1}$ ,  $c_t \equiv (\hat{c} - c)/\tau$ ,  $c^{(\sigma)} \equiv \sigma\hat{c} + (1 - \sigma)c$  (см. [9, 7]). От полудискретной аппроксимации (9) можно перейти к разностной схеме, аппроксимировав  $\dot{a}_i$  разностью  $a_t$  и использовав взвешенную аппроксимацию для остальных членов:

$$a_t + \lambda^{(\sigma)} a_{\bar{x}}^{(\sigma)} = \kappa^{(\sigma)} a_{\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)} + \theta_3^{(\sigma)} a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)} + \mu_4^{(\sigma)} a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)} + \theta_5^{(\sigma)} a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)} + \mu_6^{(\sigma)} a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}. \quad (11)$$

Вместо  $\lambda^{(\sigma)}$ ,  $\kappa^{(\sigma)}$ ,  $\theta_3^{(\sigma)}$ ,  $\mu_4^{(\sigma)}$ ,  $\theta_5^{(\sigma)}$ ,  $\mu_6^{(\sigma)}$  можно было бы использовать  $\lambda(t_{n+\sigma})$ ,  $\kappa(t_{n+\sigma})$ ,  $\theta_3(t_{n+\sigma})$ ,  $\mu_4(t_{n+\sigma})$ ,  $\theta_5(t_{n+\sigma})$ ,  $\mu_6(t_{n+\sigma})$ , где  $t_{n+\sigma} \equiv t_n + \sigma\tau$ . Исследуем вопрос устойчивости схемы (11) (об устойчивости схем (10) см. [7]). Для упрощения выкладок предположим (см. [9, 7]), что область по пространственной переменной  $x$  неограничена, сеточные функции финитны [9], а коэффициенты схемы (11) “заморожены” по пространству (не зависят от  $x_i$ ). Для произвольных сеточных функций  $y$  и  $v$  введем скалярное произведение  $(y, v) = \sum_i y_i v_i h$  и норму  $\|y\| = \sqrt{(y, y)}$ . Докажем теорему, что предоставляет достаточные условия для строгой равномерной устойчивости [9] схемы (11) в норме  $\|\cdot\|$  по начальному условию.

**Теорема.** Если  $\sigma \geq 1/2$ ,  $\kappa^{(\sigma)} \geq 0$ ,  $\mu_4^{(\sigma)} \leq 0$ ,  $\mu_6^{(\sigma)} \geq 0$ , а  $\lambda^{(\sigma)}$ ,  $\theta_3^{(\sigma)}$  и  $\theta_5^{(\sigma)}$  могут принимать произвольные действительные значения, то для решения схемы (11) справедливо  $\|\hat{a}\| \leq \|a\|$ .

**Доказательство.** Умножим скалярно уравнение (11) на  $a^{(\sigma)}$ . Представляя  $a^{(\sigma)}$  в виде  $a^{(1/2)} + (\sigma - 1/2)\tau a_t$  и учитывая, что  $(a_t, a^{(1/2)}) = (\|\hat{a}\|^2 - \|a\|^2)/2\tau$ , получаем  $(a_t, a^{(\sigma)}) = (\|\hat{a}\|^2 - \|a\|^2)/2\tau + (\sigma - 1/2)\tau \|a_t\|^2$ . В дальнейшем будем использовать разностные аналоги формул интегрирования по частям и формул Грина [9]:  $(y_{\bar{x}}, v) = -(y, v_x)$ ,  $(y_x, v) = -(y, v_{\bar{x}})$ ,  $(y_{\bar{x}\bar{x}}, v) = (y, v_{\bar{x}\bar{x}})$ . Тогда для выражения  $(a_{\bar{x}}^{(\sigma)}, a^{(\sigma)})$  имеем (кососимметричность оператора центральной разности)  $(a_{\bar{x}}^{(\sigma)}, a^{(\sigma)}) = ((a_x^{(\sigma)}, a^{(\sigma)}) + (a_{\bar{x}}^{(\sigma)}, a^{(\sigma)}))/2 = ((a_x^{(\sigma)}, a^{(\sigma)}) - (a^{(\sigma)}, a_x^{(\sigma)}))/2 = 0$ . Аналогично,  $(a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}, a^{(\sigma)}) = -(a_{\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}, a_{\bar{x}}^{(\sigma)}) = 0$  и  $(a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}, a^{(\sigma)}) = (a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}, a_{\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}) = 0$ . Далее,  $(a_{\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}, a^{(\sigma)}) = -(a_{\bar{x}}^{(\sigma)}, a_{\bar{x}}^{(\sigma)}) = -\|a_{\bar{x}}^{(\sigma)}\|^2$ . Аналогично, для 4-й разностной производной получаем выражение  $(a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}, a^{(\sigma)}) = (a_{\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}, a_{\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}) = \|a_{\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}\|^2$ . И, наконец,

$(a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}, a^{(\sigma)}) = (a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}, a_{\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}) = -(a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}, a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}) = -\|a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}\|^2$ . В результате всех этих преобразований получаем энергетическое тождество

$$(\|\hat{a}\|^2 - \|a\|^2)/2\tau + (\sigma - 1/2)\tau\|a_t\|^2 + \kappa^{(\sigma)}\|a_{\bar{x}}^{(\sigma)}\|^2 - \mu_4^{(\sigma)}\|a_{\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}\|^2 + \mu_6^{(\sigma)}\|a_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}}^{(\sigma)}\|^2 = 0,$$

из которого, в силу условий теоремы, вытекает неравенство  $\|\hat{a}\| - \|a\| \leq 0$ . Теорема доказана.

1. *Finlayson B. A.* Numerical methods for problems with moving fronts. – Seattle; Washington: Ravenna Park Publ., 1992. – 613 p.
2. *Roos H.-G., Stynes M., Tobiska L.* Robust numerical methods for singularly perturbed differential equations. – Berlin: Springer-Verlag, 2008. – 604 p.
3. *Сирік С. В., Сальніков Н. Н.* Численное интегрирование уравнения Бюргерса методом Петрова–Галеркина с адаптивными весовыми функциями // Пробл. управления и информатики. – 2012. – № 1. – С. 94–110.
4. *Zienkiewicz O. Z., Taylor R. L.* The finite element method. Vol. 1: The basis. – Oxford: Butterworth-Heinemann, 2000. – 690 p.
5. *Hansbo P.* Aspects of conservation in finite element flow computations // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. – 1994. – **117**. – P. 423–437.
6. *Wendland E., Schulz H. E.* Numerical experiments on mass lumping for the advection-diffusion equation // Revista Minerva. – 2005. – **2**, No 2. – P. 227–233.
7. *Сирік С. В.* Анализ применения сосредоточенных аппроксимаций в методе конечных элементов при решении задач конвекции-диффузии // Кибернетика и систем. анализ. – 2013. – № 5. – С. 152–163.
8. *Guermont J.-L., Pasquetti R.* A correction technique for the dispersive effects of mass lumping for transport problems // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. – 2013. – **253**. – P. 186–198.
9. *Самарский А. А., Попов Ю. П.* Разностные методы решения задач газовой динамики: Изд. 5-е. – Москва: Либроком, 2009. – 424 с.
10. *Скворцов Л. М.* Простые явные методы численного решения жестких обыкновенных дифференциальных уравнений // Вычислит. методы и программирование. – 2008. – **9**. – С. 154–162.

НТУ України “Київський політехнічний інститут”  
 Інститут космічних досліджень НАН  
 і ГКА України, Київ

Поступило в редакцію 09.01.2013

**С. В. Сірик, М. М. Сальніков**

### **Про застосування зосередження в методі скінченних елементів Петрова–Гальоркіна при розв’язанні задач конвекції-дифузії**

*Розглянуто питання протидії дисперсійним та дисипативним ефектам, що виникають після застосування зосередження в скінченноелементному методі Петрова–Гальоркіна при розв’язанні задач конвекції-дифузії. Узагальнено деякі результати в даній області, отримані раніше, та проведено порівняння з іншими існуючими підходами. Теоретичні результати дослідження підтверджуються розрахунковими даними.*

**S. V. Siryk, N. N. Salnikov**

### **On the application of mass lumping in the Petrov–Galerkin finite element method for convection-diffusion problems**

*We address the topics of overcoming the dispersive and dissipative effects that arise after the application of mass lumping in the finite-element Petrov–Galerkin method for convection-diffusion problems. A generalization of some earlier results in this field is carried out, as well as the comparison with other existing approaches. The test calculations confirm the theoretical results obtained.*

## Осесимметричное потенциально-вихревое течение со свободной границей

*Доказана разрешимость краевой задачи со свободной границей. Построено приближенное решение методом Рунца. Доказана сходимость приближенного решения к точному в интегральной метрике.*

**Постановка задачи.** Изучается осесимметричное течение, когда ось  $Ox$  является осью симметрии потока в следующей постановке. Обозначим через  $D$  область, ограниченную снизу отрезком  $A = (0 \leq x \leq a, y = 0)$ , сверху — кривой  $P: y = g(x), 0 \leq x \leq a$ , где  $g(0) = b_1, g(a) = b_2, b_1 \leq b_2$ , а  $g(x)$  — аналитическая, монотонно возрастающая функция при  $x \in [0, a]$ , причем  $g'(0) = 0, g'(a) = b$ . Боковую часть границы области  $D$ , состоящую из вертикалей, обозначим через  $Q_1 = (x = 0, 0 \leq y \leq b_1)$  и  $Q_2 = (x = a, 0 \leq y \leq b_2)$ . Пусть  $\gamma$  — жорданова дуга в  $D$ , концы которой лежат на вертикалях  $Q_1$  и  $Q_2$ , причем все точки  $\gamma$ , включая и концы, расположены ниже кривой  $P$ . Кривая  $\gamma$  разбивает область  $D$  на две односвязные области  $G_\gamma$ , находящиеся выше  $\gamma$  и  $\Omega_\gamma$ . Такие дуги будем называть допустимыми. Концы  $\gamma$  разбивают вертикали  $Q_1$  и  $Q_2$  на два открытых множества —  $R_1$ -боковую часть границы области  $G_\gamma$  и  $R_2$ -боковую часть границы области  $\Omega_\gamma$ .

Рассматривается задача: требуется определить функции тока  $\psi_1(x, y), \psi_2(x, y)$  и свободную границу  $\gamma$  по условиям

$$\psi_{1xx} + \psi_{1yy} - y^{-1}\psi_{1y} = \bar{\omega}y, \quad (x, y) \in G_\gamma, \quad (1)$$

$$\psi_{1x} = 0, \quad (x, y) \in R_1; \quad \psi_1 = C, \quad (x, y) \in P; \quad \psi_1 = 1, \quad (x, y) \in \gamma, \quad (2)$$

$$\psi_{2xx} + \psi_{2yy} - y^{-1}\psi_{2y} = 0, \quad (x, y) \in \Omega_\gamma, \quad (3)$$

$$\psi_{2x} = 0, \quad (x, y) \in R_2; \quad \psi_2 = 0, \quad (x, y) \in A; \quad \psi_2 = 1, \quad (x, y) \in \gamma, \quad (4)$$

$$|\nabla\psi_1| = |\nabla\psi_2| = 0, \quad (x, y) \in \gamma. \quad (5)$$

Здесь  $\omega = \text{const} > 0$ , а  $C = \text{const} > 1$ . Ранее в работе [1] отдельно изучались случаи потенциального и вихревого течения, когда на свободной границе задавалось условие Бернулли в виде неравенства.

**Вариационная постановка задачи.** Рассмотрим функционал

$$Y(\psi_1, \psi_2, \gamma) = \iint_{G_\gamma} [\psi_{1x}^2 + \psi_{1y}^2 + 2\omega(\psi_1 - 1)] \frac{dx dy}{y} + \iint_{\Omega_\gamma} [\psi_{2x}^2 + \psi_{2y}^2] \frac{dx dy}{y} \quad (6)$$

на множестве  $V$  допустимых троек  $(\psi_1, \psi_2, \gamma)$ , обладающих следующими свойствами:  $\gamma$  — допустимая дуга; функция  $\psi_1(x, y)$  определена и непрерывна в замыкании области  $G_\gamma$ , кусочно-непрерывно дифференцируема в  $G_\gamma$ , равна единице на  $\gamma$  и постоянной  $C$  при

$(x, y) \in P$ ; функция  $\psi_2(x, y)$  определена и непрерывна в замыкании области  $\Omega_\gamma$ , кусочно-непрерывно дифференцируема в  $\Omega_\gamma$ , равна единице на  $\gamma$  и нулю при  $(x, y) \in A$ , причем  $Y(\psi_1, \psi_2, \gamma) < \infty$ .

**Лемма 1.** Пусть тройка  $(\psi_1, \psi_2, \gamma)$  является классическим решением задачи (1)–(5). Тогда эта тройка будет стационарной для функционала (6) на множестве  $V$ . Обратно, каждая стационарная тройка  $(\psi_1, \psi_2, \gamma)$  функционала (6) на множестве  $V$ , где  $\gamma$  — достаточно гладкая кривая, является решением задачи (1)–(5).

Лемма 1 позволяет свести разрешимость нелинейной задачи (1)–(5) к проблеме минимума функционала (6) на множестве  $V$ .

Далее можно установить существование таких последовательностей  $\gamma_k$  и  $\widehat{\gamma}_k$  линий уровня функций  $\psi_1(x, y)$  и  $\psi_2(x, y)$ , являющихся решением задач соответственно (1), (2) и (3), (4) так, что  $\gamma_k = \{(x, y): (x, y) \in G_\gamma, \psi_1(x, y) = C_k\}$ ,  $\widehat{\gamma}_k = \{(x, y): (x, y) \in \Omega_\gamma, \psi_2(x, y) = \widehat{C}_k\}$ , а  $C_k$  и  $\widehat{C}_k$  монотонно стремятся к единице при  $k \rightarrow \infty$ .

**Симметризация областей  $G_\gamma$  и  $\Omega_\gamma$ .** Пусть  $V_\gamma$  — подмножество множества  $V$ , состоящее из всех троек  $(\psi_1, \psi_2, \gamma)$ , где  $\gamma$  — фиксированная допустимая кривая. С помощью вариационного подхода доказывается лемма.

**Лемма 2.** Существует единственная тройка  $(\psi_1, \psi_2, \gamma)$ , на которой функционал (6) достигает своего наименьшего значения. При этом функции  $\psi_1(x, y)$  и  $\psi_2(x, y)$  являются единственными решениями соответственно задач (1), (2) и (3), (4).

Пусть теперь  $\gamma$  — произвольная допустимая кривая,  $\psi_1(x, y)$  — решение задачи (1), (2) в заданной области  $G_\gamma$ , а  $\psi_2(x, y)$  — решение задачи (3), (4) в  $\Omega_\gamma$ . Введем в рассмотрение множества

$$G_1 = \{(x, y) \in G_\gamma: \psi_1(x, y) < 1\}, \quad L_1 = \{(x, y) \in R_1: \psi_1(x, y) < 1\}, \\ G_2 = \{(x, y) \in G_\gamma: \psi_1(x, y) > 1\}, \quad L_2 = \{(x, y) \in R_1: \psi_1(x, y) > 1\}.$$

**Лемма 3.** Пусть  $(\psi_1, \psi_2, \gamma)$  — допустимая тройка, причем  $\psi_1(x, y)$  — решение задачи (1), (2), а  $\psi_2(x, y)$  — решение задачи (3), (4). Просимметризуем область  $G_2$  относительно осей координат. Полученную область обозначим через  $G^*$ , а ее свободную границу — через  $\gamma^*$ . Пусть  $\psi_1^*(x, y)$  — решение задачи (1), (2) в  $G^*$ , а  $\psi_2^*(x, y)$  — решение задачи (3), (4) в  $\Omega^* = \text{int}(D \setminus G^*)$ . Тогда  $Y(\psi_1^*, \psi_2^*, \gamma^*) \leq Y(\psi_1, \psi_2, \gamma)$ , причем  $\psi_{1y}^* > 0$  в  $G^*$ , а  $\psi_{2y}^* > 0$  в  $\Omega^*$  и  $\gamma^*$  задается уравнением

$$x = x(t), \quad y = y(t), \quad 0 \leq t \leq T, \quad (7)$$

где  $x(t)$  и  $y(t)$  — неубывающие функции параметра  $t$ .

**Теорема существования.** Пусть  $d$  — точная нижняя грань функционала (6) на множестве  $V$  и  $(\psi_{1n}, \psi_{2n}, G_n, \Omega_n)$  — минимизирующая последовательность. На основании леммы 3 можно считать, что  $G_n$  и  $\Omega_n$  имеют свободную границу  $\gamma_n$ , заданную уравнениями типа (7). В силу леммы 2 в качестве функций  $\psi_{1n}$  и  $\psi_{2n}$  можно брать решения задач (1), (2) и (3), (4) соответственно в областях  $G_n$  и  $\Omega_n$ . Применяя затем метод внутренних вариаций Шиффера и симметризацию Штейнера [1–3], докажем теорему.

**Теорема 1.** Пусть функция  $g(x)$  монотонно возрастает в  $[0, a]$ , является аналитической функцией переменной  $x$  при  $0 \leq x \leq a$  и, кроме того,  $g'(0) = 0$ ,  $g'(a) = 0$ . И пусть также выполнено условие  $1 - \omega a^2/2 > 0$ . Тогда существует единственное решение  $(\psi_1, \psi_2, \gamma)$  задачи (1)–(5), удовлетворяющее условиям  $\psi_{1y} > 0$  в  $G_\gamma$ , а  $\psi_{2y} > 0$  в  $\Omega_\gamma$ . При этом  $\gamma$

является монотонно-возрастающей дугой, аналитической в окрестности каждой своей внутренней точки, причем  $\gamma$  не имеет общих точек с кривой  $P$  и отрезком  $A$ . Функции  $\psi_1(x, y)$  и  $\psi_2(x, y)$  непрерывны в  $\overline{G_\gamma}$  и  $\overline{\Omega_\gamma}$ , непрерывно дифференцируемы вплоть до границы всюду за исключением концевых точек  $\gamma$ .

**Решение задачи (1)–(5) методом Ритца.** Функционал (6) в классе функций  $\psi_{1y} > 0$  в  $\overline{G_\gamma}$  и  $\psi_{2y} > 0$  в  $\overline{\Omega_\gamma}$  представим следующим образом:

$$Y_1(z_1, z_2) = \iint_{\Delta_1} \left[ \left( z_{1x} + \frac{g_x}{g} z_1 \right)^2 + \frac{1}{g^2} + 2\omega(\varphi - 1) z_1 z_{1\varphi}^2 \right] \frac{dxdy}{z_1 z_{1\varphi}} + \iint_{\Delta_2} \left[ \left( z_{2x} + \frac{g_x}{g} z_2 \right)^2 + \frac{1}{g^2} \right] \frac{dxdy}{z_2 z_{2\varphi}}, \quad (8)$$

где  $\Delta_1 = (0 < x < a, 1 < \varphi < C)$ ,  $\Delta_2 = (0 < x < a, 0 < \varphi < 1)$ ,  $z_1(x, \varphi)$  и  $z_2(x, \varphi)$  — функции, определенные соответственно в  $\overline{\Delta_1}$  и  $\overline{\Delta_2}$  и являющиеся решениями уравнений  $\varphi_1(x, z)\varphi_1 = 0$ ,  $\varphi_2(x, z) - \varphi_2 = 0$ ,  $\psi_1(x, zg(x)) = \varphi_1(x, z)$ ,  $\psi_2(x, zg(x)) = \varphi_2$ . Функционал (8) будем минимизировать на множестве допустимых функций

$$G_z = \left\{ (z_1, z_2) : z_1 \in C^1(\overline{\Delta_1}), z_2 \in C^1(\overline{\Delta_2}), \sqrt{\varphi} z_{2\varphi} \in C(\overline{\Delta}), z_2(x, 0) = 0, z_1(x, 1) = z_2(x, 1), \min_{(x, \varphi) \in \Delta_1} z_{1\varphi} > 0, \min_{(x, \varphi) \in \Delta_2} z_{2\varphi} > 0 \right\}. \quad (9)$$

Обозначим через  $(z_1^*, z_2^*)$  пару, соответствующую решению задачи (1)–(5). Очевидно, что  $(z_1^*, z_2^*) \in G_z$ . Далее, положим  $w(x, \varphi) = \ln z(x, \varphi)$ . Тогда семейство допустимых функций  $G_z$  перейдет в новое семейство  $G_w$ , при этом имеем

$$Y_2(w_1, w_2) = \iint_{\Delta_1} \left[ \left( w_{1x} + \frac{g_x}{g} \right)^2 + \frac{e^{-2w_1}}{g^2} + 2\omega g(\varphi - 1) e^{w_1} w_{1\varphi}^2 \right] \frac{dxdy}{w_{1\varphi}} + \iint_{\Delta_2} \left[ \left( w_{2x} + \frac{g_x}{g} \right)^2 + \frac{e^{-2w_2}}{g^2} \right] \frac{dxdy}{w_{2\varphi}}, \quad (10)$$

где  $Y_1(z_1, z_2) = Y_1(e^{w_1}, e^{w_2}) = Y_2(w_1, w_2)$ ;  $w_{1\varepsilon} = w_1^* + \varepsilon \delta w_1$ ;  $w_{2\varepsilon} = w_2^* + \varepsilon \delta w_2$ ;  $\delta w_1 = w_1 - w_1^*$ ;  $\delta w_2 = w_2 - w_2^*$ ;  $w_1^* = \ln z_1^*$ ;  $w_2^* = \ln z_2^*$ ;  $0 \leq \varepsilon \leq 1$ , а  $w_1, w_2$  — произвольная пара из  $G_w$ . Используя теперь формулу Фридрихса [4], получим

$$Y_2(w_1, w_2) = Y_2(w_1^*, w_2^*) + \frac{d}{d\varepsilon} Y_2(w_{1\varepsilon}, w_{2\varepsilon}) \Big|_{\varepsilon=0} + \int_0^1 (1 - \varepsilon) \frac{d^2}{d\varepsilon^2} Y_2(w_{1\varepsilon}, w_{2\varepsilon}). \quad (11)$$

Учитывая, что первая вариация функционала  $Y_2(w_1, w_2)$ , вычисленная на паре  $(w_1^*, w_2^*)$ , обратится в ноль, а вторая вариация этого функционала в силу [3] положительно определена, заключаем, что  $Y_1(z_1^*, z_2^*) = Y_2(w_1^*, w_2^*) \leq Y_2(w_1, w_2) = Y_1(z_1, z_2)$  для любой пары  $(z_1, z_2) \in G_z$ .

Тогда получим утверждение.

**Лемма 4.** Пара  $(z_1^*, z_2^*) \in G_z$ , соответствующая решению задачи (1)–(5), доставляет наименьшее значение функционалу (10) на множестве (9).

Будем минимизировать функционал (8) на множестве (9) при помощи сумм:

$$z_{1n}(x, \varphi) = 1 + \frac{c - \varphi}{c - 1} \sum_{k=0}^L \sum_{j=0}^{M_j} b_{kj} x^j \varphi^k, \quad z_{2n}(x, \varphi) = \sqrt{\varphi} \sum_{k=0}^L \sum_{j=0}^{M_j} a_{kj} x^j \varphi^k, \quad (12)$$

где  $n = \sup(j + M_j)$  при  $0 \leq j \leq L$ . Включение  $(z_{1n}, z_{2n}) \in G_z$  выделяет в евклидовом пространстве  $E_r$  коэффициентов  $a_{kj}$ ,  $b_{kj}$  область допустимости  $G_r$ , где  $r = \sum_{k=0}^L (1 + 2M_k)$ ,  $G_2 = G_r^+ \cap E_0$ ,  $G_r^+ = G_r^1 \oplus G_r^2$ ,  $E_0 = E_0^0 \oplus E_1^0 \oplus \dots \oplus E_L^0$ ,

$$G_r^1 = \left\{ b_{kj} : \min_{(x, \varphi) \in \overline{\Delta_1}} z_{1n\varphi} > 0 \right\}, \quad G_r^2 = \left\{ a_{kj} : \min_{(x, \varphi) \in \overline{\Delta_2}} z_{2n\varphi} > 0 \right\},$$

$$E_0^0 : \sum_{k=1}^{M_0} a_{ko} = \sum_{k=0}^{M_0} b_{ko} + 1; \quad E_j^0 : \sum_{k=1}^{M_j} a_{kj} = \sum_{k=0}^{M_j} b_{kj}, \quad j = 1, 2, \dots, L; \quad L = \max_{0 \leq k \leq M} L_k.$$

Неизвестные коэффициенты  $a_{kj}$ ;  $b_{kj}$  определяются из нелинейной системы Ритца [3, 5, 6].

**Теорема 2.** Функция  $Y_1(a_{kj}, b_{kj})$  принимает свое наименьшее значение в некоторой внутренней точке множества  $G_r$ , лежащей на конечном расстоянии от начала координат. При этом нелинейная система Ритца имеет, по крайней мере, одно решение на множестве  $G_r$ .

**Сходимость приближений Ритца.** Решив систему Ритца при каждом фиксированном  $n$ , можно затем построить последовательность приближений (12) в виде  $z_{1n}(x, \varphi) = z_{1n}^*$ ,  $z_{2n}(x, \varphi) = z_{2n}^*$ .

**Лемма 5.** Приближения (12), построенные по методу Ритца, образуют минимизирующую последовательность для функционала (8) на множестве (9).

**Теорема 3.** Пусть выполнены все предположения теоремы 1. Тогда справедливы следующие предельные соотношения при  $n \rightarrow \infty$ :

$$\begin{aligned} \iint_D [(\psi_{nx} - \psi_x)^2 + (\psi_{ny} - \psi_y)^2] \frac{dx dy}{y} &\rightarrow 0, \\ \iint_{G_\gamma} [(\psi_{1nx} - \psi_{1x})^2 + (\psi_{1ny} - \psi_{1y})^2] \frac{dx dy}{y} &\rightarrow 0, \\ \iint_{\Omega_\gamma} [(\psi_{2nx} - \psi_{2x})^2 + (\psi_{2ny} - \psi_{2y})^2] \frac{dx dy}{y} &\rightarrow 0, \end{aligned}$$

где  $(\psi_1, \psi_2, \gamma)$  – точное решение задачи (1)–(5);  $\psi_1(x, z_{1n}(x, \varphi)g(x)) = \psi_{1n}$ ;  $\psi_2(x, z_{2n}(x, \varphi)g(x)) = \psi_{2n}$ ;  $\psi_n = \psi_{1n}$  при  $(x, y) \in G_\gamma$  и  $\psi_n = \psi_{2n}$ , если  $(x, y) \in \Omega_\gamma$ .

1. Миненко А. С. Вариационные задачи со свободной границей. – Киев: Наук. думка, 2005. – 354 с.
2. Миненко А. С., Шевченко А. И. Методы исследования нелинейных математических моделей. – Киев: Наук. думка, 2012. – 130 с.
3. Миненко А. С. Осесимметричное течение со свободной границей // Укр. мат. журн. – 1995. – 47, № 4. – С. 477–487.



4. *Friedrich K. O.* Uber ein Minimumproblem für Potentialströmungen mit freiem Rande // *Math. Ann.* – 1933. – **109**, No 1. – P. 60–82.
5. *Данилюк И. И., Міненко А. С.* О методе Ритца в одной нелинейной задаче со свободной границей // *Докл. АН УССР. Сер. А.* – 1978. – № 4. – С. 291–294.
6. *Міненко А. С.* О минимизации одного интегрального функционала методом Ритца // *Укр. мат. журн.* – 2006. – **58**, № 10. – С. 1358–1394.

*Донецкий национальный технический университет*

*Поступило в редакцию 04.11.2013*

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

### **Осесиметрична потенціально-вихрова течія з вільною межею**

*Доведено розв'язність крайової задачі з вільною межею. Побудовано наближений розв'язок методом Ритца. Доведено збіжність наближеного розв'язку до точного в інтегральній метриці.*

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

### **Axially symmetric potentially rotational flow with free boundary**

*The solvability of a boundary-value problem with free boundary is proved. The approximate solution is constructed using the Ritz method. The convergence of the approximate solution to the exact one in the integral metric is proved.*



УДК 539.375

А. А. Каминский, М. В. Дудик, Л. А. Кипнис

### **Влияние области деструкции материала вблизи вершины межфазной трещины на условия ее страгивания**

*(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины В. Л. Богдановым)*

*В условиях плоской деформации методом Винера–Хопфа вблизи вершины межфазной трещины сдвига, берега которой взаимодействуют с трением, в рамках комплексной модели выполнен расчет области деструкции в прилегающей к вершине части начальной зоны предразрушения. В области деструкции допускается разрыв как нормального, так и касательного перемещения. Получены выражения для расчета длины области деструкции и раскрытия трещины. С помощью деформационного критерия исследовано влияние области деструкции на страгивание трещины. Обнаружено, что страгивание трещины происходит в результате относительного сдвига ее берегов вблизи вершины.*

Исследование начального этапа развития зоны предразрушения вблизи вершины межфазной трещины в условиях сдвига, выполненное в соответствии с [1], предсказывает сохранение концентрации напряжений после образования зоны и, как следствие, неизбежное появление в прилегающей к вершине трещины части зоны предразрушения области повышенной деформации материала — области деструкции. В случае упруго-пластического тела этот вывод согласуется с экспериментальными данными, которые указывают на сложную структуру зоны предразрушения вблизи остроконечных концентраторов напряжений, состоящей из достаточно развитой пластической зоны и весьма малой области деструкции, прилегающей непосредственно к вершине концентратора [2, 3]. Для учета данного факта был предложен ряд моделей: модель когезионной зоны, содержащей зону процесса разрушения [4, 5], модель зоны предразрушения в линейно упрочняющемся материале с зоной разрыхления [6], комплексная модель зоны предразрушения с областью деструкции [7, 8]. При различии терминологии исходные предпосылки указанных моделей близки и базируются на развитии модели Леонова–Панасюка–Дагдейла, представляющей зону предразрушения линией разрыва перемещения, на которой задано то или иное условие перехода материала в состояние предразрушения. В данной работе методом Винера–Хопфа выполнен расчет области деструкции вблизи вершины межфазной трещины в рамках комплексной

© А. А. Каминский, М. В. Дудик, Л. А. Кипнис, 2014

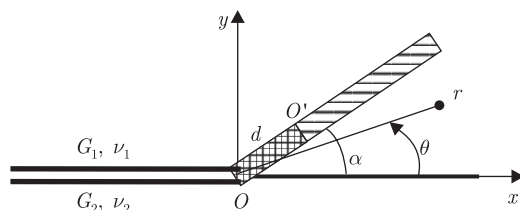


Рис. 1

модели, предполагающей образование зоны контакта берегов и боковой зоны предразрушения. С использованием деформационного критерия разрушения исследованы условия страгивания трещины.

**Постановка задачи.** Пусть из вершины межфазной трещины, расположенной на плоской границе раздела двух различных изотропных упругих материалов с упругими постоянными  $G_1, \nu_1$  и  $G_2, \nu_2$ , в условиях плоской деформации в менее трещиностойком материале (для определенности, в первом) распространяется узкая зона предразрушения, длина которой значительно меньше длины трещины. Предполагается, что при преобладании сдвигающих нагрузок берега трещины вблизи вершины образуют зону контакта с трением [9, 10], размер которой соизмерим с длиной самой трещины [11]. Вследствие отрывного характера развития зоны предразрушения она моделируется наклоненной под углом  $\alpha$  к границе раздела сред прямой линией разрыва нормального смещения, на которой нормальное напряжение равно сопротивлению отрыву первого материала  $\sigma_1$ . Величина угла  $\alpha$  определяется из условия максимума отрывного окружного напряжения.

Вблизи вершины в соответствии с выводами экспериментальных исследований [2, 3] внутри зоны предразрушения возникает область деструкции материала, обладающая высоким уровнем как отрывных, так и сдвиговых деформаций, поэтому будем ее моделировать линией длиной  $d$ , на которой терпит разрыв не только нормальное, но и касательное смещение, а касательное напряжение равно сопротивлению сдвигу первого материала  $\tau_1$  [8].

Предполагается, что длина области деструкции намного меньше длины контактной зоны и всей зоны предразрушения, поэтому исследуемое тело можно рассматривать (рис. 1) как кусочно-однородную плоскость, содержащую на границе раздела полубесконечную зону контактного проскальзывания берегов, взаимодействующих по закону сухого трения, из вершины  $O$  которой под углом  $\alpha$  к границе раздела выходит полубесконечная прямая разрыва, состоящая из двух участков. На участке, примыкающем к вершине трещины, терпят разрыв нормальное и касательное смещения, а нормальное и касательное напряжения равны  $\sigma_1$  и  $\tau_1$ . На втором участке терпит разрыв лишь нормальное смещение, а нормальное напряжение равно  $\sigma_1$ .

Данной модели соответствует статическая краевая задача теории упругости с граничными условиями [8]:

$$\begin{aligned} \theta = 0, \quad \langle \sigma_\theta \rangle = \langle \tau_{r\theta} \rangle = 0, \quad \langle u_\theta \rangle = \langle u_r \rangle = 0; \\ \theta = \pm\pi, \quad \langle \sigma_\theta \rangle = \langle \tau_{r\theta} \rangle = 0, \quad \langle u_\theta \rangle = 0, \quad \tau_{r\theta} = -\mu\sigma_\theta; \\ \theta = \alpha, \quad \langle \sigma_\theta \rangle = \langle \tau_{r\theta} \rangle = 0; \quad \theta = \alpha, \quad \sigma_\theta = \sigma_1; \end{aligned} \quad (1)$$

$$\theta = \alpha, \quad r < d, \quad \tau_{r\theta} = \tau_1; \quad \theta = \alpha, \quad r > d, \quad \langle u_r \rangle = 0, \quad (2)$$

где  $\langle f \rangle$  — скачок величины  $f$ ;  $\mu$  — коэффициент трения.

При  $r \rightarrow \infty$  главные члены разложений напряжений в асимптотические ряды совпадают с главными членами разложений напряжений в асимптотические ряды при  $r \rightarrow 0$  в задаче, аналогичной рассматриваемой, в случае  $d = 0$  (без области деструкции) и с конечной боковой линией разрыва, решенной в [1]. В частности,

$$\theta = \alpha, \quad r \rightarrow \infty, \quad \tau_{r\theta} = f_1(\alpha, e, \nu_1, \nu_2)\sigma_1 + \sum_{i=1}^2 C_i f_{2i}(\alpha, e, \nu_1, \nu_2) r^{\lambda_i} + o\left(\frac{1}{r}\right), \quad (3)$$

где  $e = G_1/G_2$ ;  $C_i = \sigma_1 l^{-\lambda_i}$ ;  $l$  — найденное в соответствии с [1] значение всей длины зоны предразрушения, зависящее от величины и конфигурации внешней нагрузки, заданной коэффициентом интенсивности напряжений  $k_{II}$  в конце трещины, который предполагается известным из решения внешней задачи;  $\lambda_i$  — принадлежащие интервалу  $(-1, 0)$  корни уравнения  $D_1(-1 - x) = 0$ ;

$$f_1 = \frac{T(-1)}{D_1(-1)}, \quad f_{2i} = \frac{T(-1 - \lambda_i)}{D_1'(-1 - \lambda_i)} \frac{K^+(-1 - \lambda_i)}{K^+(-1)} \frac{J(\lambda_i)}{J(0)} \frac{\lambda}{\lambda_i(\lambda_i - \lambda)},$$

$$D_1'(p) = \frac{dD_1(p)}{dp}, \quad T(p) = T_0(p) + \mu T_1(p),$$

$$T_0(p) = (1 + \chi_1)T_{01}(p) + (1 - e)T_{02}(p),$$

$$T_{01}(p) = 0,5(1 + \chi_1)^2[\sin 2\alpha + \sin 2p(\pi - \alpha)] + (1 + \chi_1)e(1 + \chi_2)(p + 1) \sin 2\alpha \cos 2p\alpha - e^2(1 + \chi_2)^2 T_{03}(p),$$

$$T_{02}(p) = 2(1 - e)(1 + \chi_1)(p + 1) \sin \alpha [2 \cos \alpha \sin^2 p\alpha - p \sin \alpha \sin 2p(\pi - \alpha)] - 4(1 + e\chi_2)e(1 + \chi_2) \cos p\pi T_{04}(p) - (1 + \chi_1)e(1 + \chi_2)T_{05}(p) + (1 + \chi_1)^2 [p \sin 2\alpha \cos 2p\alpha - 2 \sin 2\alpha \sin^2 p\alpha - \sin 2p(\pi - \alpha)],$$

$$T_{03}(p) = 2p^2 \sin^2 \alpha \sin 2p\alpha + 2p \sin \alpha (\sin \alpha \sin 2p\alpha - \cos \alpha) + 0,5[\sin 2p(\pi - \alpha) - \sin 2\alpha],$$

$$T_{04}(p) = p(p + 1) \sin^2 \alpha \sin p(\pi - 2\alpha),$$

$$T_{05}(p) = (p + 1)\{2p \sin^2 \alpha [\sin 2p\alpha + \sin 2p(\pi - \alpha)] - \sin 2\alpha(1 + 2 \sin^2 p\alpha)\} + \sin 2\alpha + \sin 2p(\pi - \alpha);$$

$$T_1(p) = (1 + \chi_1)T_{11}(p) + 4(1 - e)(1 + e\chi_2)(1 + e\chi_2 - e - \chi_1) \sin p\pi T_{04}(p),$$

$$T_{11}(p) = (1 + \chi_1)^2 [\sin^2 p(\pi - \alpha) - \cos^2 \alpha] + e^2(1 + \chi_2)^2 [4p(p + 1) \sin^2 \alpha \sin^2 p\alpha + \sin^2 p(\pi - \alpha) - \cos^2 \alpha] - 2(1 + \chi_1)e(1 + \chi_2) [2p \sin^2 \alpha \sin^2 p\alpha + \sin^2 p(\pi - \alpha) + \cos^2 \alpha \cos 2p\alpha] - 4(1 - e)(1 + \chi_1) [(p + 1) \sin^2 \alpha \sin^2 p\alpha + \sin p\pi \sin p(\pi - 2\alpha)] + 4(1 - e)^2 [p(p + 2) \sin^2 \alpha \sin^2 p\alpha + \sin^2 p(\pi - \alpha) - \sin^2 p\alpha \cos^2 \alpha] + 4(1 - e)e(1 + \chi_2) [(2p + 1)(p + 1) \sin^2 \alpha \sin^2 p\alpha + \sin p\pi \sin p(\pi - 2\alpha)];$$

$$J(x) = \exp \left[ \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{(x+1) |\ln G(it)| + t \arg(G(it))}{t^2 + (x+1)^2} dt \right]; \quad \chi_{1(2)} = 3 - 4\nu_{1(2)},$$

$\lambda$  — корень уравнения  $\operatorname{ctg} \lambda\pi + \mu\beta = 0$  на интервале  $(-1, 0)$ . Здесь и ниже выражения для  $D_1(p)$ ,  $G(p)$ ,  $K^+(p)$  и некоторых других величин, определенных в [1], из-за громоздкости не приводятся.

В точке  $O'$  в соответствии с общими положениями о поведении напряжений вблизи остроконечных концентраторов имеет место корневая особенность напряжений:

$$\theta = \alpha, \quad r \rightarrow d + 0, \quad \tau_{r\theta} \sim \frac{K}{\sqrt{2\pi(r-d)}}, \quad (4)$$

где  $K$  — коэффициент интенсивности напряжений в конце линии разрыва  $OO'$ , который должен быть определен в ходе решения задачи.

Решение сформулированной краевой задачи (1)–(3) будем искать в виде суммы решений следующих двух задач. Первая отличается от нее тем, что в (1) вместо последнего условия и в (2) вместо первого условия принимаем

$$\theta = \alpha, \quad \sigma_\theta = 0; \quad \theta = \alpha, \quad r < d, \quad \tau_{r\theta} = \tau_1 - f_1\sigma_1 - \sum_{i=1}^2 C_i f_{2i} r^{\lambda_i}, \quad (5)$$

а на бесконечности напряжения убывают как  $o(1/r)$ . Вторая задача — задача, аналогичная исходной, при  $d = 0$ , решение которой получено в [1].

**Определение параметров области деструкции.** Применяя к уравнениям равновесия, условию совместности деформаций, закону Гука и граничным условиям (1) преобразование Меллина [12] и учитывая второе условие (2) и условия (5), приходим к функциональному уравнению Винера–Хопфа первой задачи в полосе  $-\varepsilon_1 < \operatorname{Re} p < \varepsilon_2$  ( $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  — достаточно малые положительные числа):

$$\begin{aligned} \Phi_1^+(p) + \frac{\tau_1 - f_1\sigma_1}{p+1} - \sum_{i=1}^2 \frac{C_i f_{2i} d^{\lambda_i}}{p + \lambda_i + 1} &= -\operatorname{tg} p\pi H(p) \Phi_1^-(p), \\ \Phi_1^+(p) &= \int_1^{\infty} \tau_{r\theta}(\rho d, \alpha) \rho^p d\rho, \quad \Phi_1^-(p) = \frac{E_1}{4(1-\nu_1^2)} \int_0^1 \left\langle \frac{\partial u_r}{\partial r} \right\rangle \Big|_{\substack{r=\rho d \\ \theta=\alpha}} \rho^p d\rho, \\ H(p) &= \frac{\cos p\pi D_2(p)}{2 \sin^2 p\pi D_1(p)}, \quad D_2(p) = D_{20}(p) - \mu D_{21}(p), \\ D_{20}(p) &= 0, 5(1 + \chi_1)e(1 + \chi_2)d_2(p)s_1(p) - s_2(p)s_0(p) + e(1 + \chi_2) \times \\ &\quad \times \cos p\pi [4e^2(1 + \chi_2)^2 d_1(p)d_4(p) - (1 + \chi_1)^2 d_3(p)d_5(p) + 2(1 + \chi_1)e(1 + \chi_2) \cos p\pi s_3(p)], \\ D_{21}(p) &= 4 \sin p\pi s_4(p) [e^2(1 + \chi_2)^2 d_4(p) + s_0(p)] + \\ &\quad + 4(1 + \chi_1)e(1 + \chi_2) [\cos p\pi \sin 2p\alpha s_4(p) + e(1 + \chi_2)p(p-1) \sin^2 \alpha \sin p(\pi - 2\alpha)], \\ s_0(p) &= (1 + \chi_1)^2 - 2(1 + \chi_1) [e(1 + \chi_2) + 2(1 - e)] \sin^2 p\alpha - [e(1 + \chi_2) + 2(1 - e)]^2 d_4(p), \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned}
s_1(p) &= 2(1 + \chi_1) \cos p\pi d_3(p) + 4e(1 + \chi_2) \sin p\pi d_1(p), \\
s_2(p) &= 2(1 + \chi_1) \sin p\pi d_3(p) - 4e(1 + \chi_2) \cos p\pi d_1(p), \\
s_3(p) &= 2 \sin p\alpha \sin p(\pi - \alpha) + p \sin 2\alpha \sin p(\pi - 2\alpha) - 2p^2 \sin^2 \alpha \cos p(\pi - 2\alpha), \\
s_4(p) &= (1 + \chi_1)d_6(p) + [e(1 + \chi_2) + 2(1 - e)]d_1(p), \\
d_1(p) &= \sin^2 p(\pi - \alpha) - p^2 \sin^2 \alpha, \quad d_2(p) = p \sin 2\alpha - \sin 2p\alpha, \\
d_3(p) &= p \sin 2\alpha - \sin 2p(\pi - \alpha), \quad d_4(p) = p^2 \sin^2 \alpha - \sin^2 p\alpha, \\
d_5(p) &= p \sin 2\alpha + \sin 2p\alpha, \quad d_6(p) = p \sin^2 \alpha - \sin^2 p(\pi - \alpha).
\end{aligned}$$

Решение уравнения (6) получено аналогично решению уравнения такого же рода в [13] и имеет вид:

$$\begin{aligned}
\Phi_1^+(p) &= -\frac{pH^+(p)}{K^+(p)} \left\{ \frac{\tau_1 - f_1\sigma_1}{p+1} \left[ \frac{K^+(p)}{pH^+(p)} + \frac{K^+(-1)}{H^+(-1)} \right] - \right. \\
&\quad \left. - \sum_{i=1}^2 \frac{C_i f_{2i} d^{\lambda_i}}{p+1+\lambda_i} \left[ \frac{K^+(p)}{pH^+(p)} + \frac{K^+(-1-\lambda_i)}{(1+\lambda_i)H^+(-1-\lambda_i)} \right] \right\} \quad (\operatorname{Re} p < 0), \\
\Phi_1^-(p) &= K^-(p)H^-(p) \left[ \frac{(\tau_1 - f_1\sigma_1)K^+(-1)}{(p+1)H^+(-1)} - \sum_{i=1}^2 \frac{C_i f_{2i} d^{\lambda_i} K^+(-1-\lambda_i)}{(p+1+\lambda_i)(1+\lambda_i)H^+(-1-\lambda_i)} \right] \quad (7) \\
&\quad (\operatorname{Re} p > 0),
\end{aligned}$$

$$\exp \left[ \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{\ln H(z)}{z-p} dz \right] = \begin{cases} H^+(p) & (\operatorname{Re} p < 0), \\ H^-(p) & (\operatorname{Re} p > 0). \end{cases}$$

Используя асимптотику (4) и найденное решение (7), получим коэффициент интенсивности напряжений в конце линии разрыва  $OO'$ :

$$K = -\sqrt{2d} \left[ \frac{(\tau_1 - f_1\sigma_1)K^+(-1)}{H^+(-1)} - \sum_{i=1}^2 \frac{C_i f_{2i} d^{\lambda_i} K^+(-1-\lambda_i)}{(1+\lambda_i)H^+(-1-\lambda_i)} \right].$$

Приравнявая  $K$  к нулю, приходим к трансцендентному уравнению для вычисления длины области деструкции:

$$\sum_{i=1}^2 \frac{C_i f_{2i} d^{\lambda_i} K^+(-1-\lambda_i) J_1(0)}{(1+\lambda_i)K^+(-1)J_1(\lambda_i)} = \tau_1 - f_1\sigma_1,$$

$$J_1(x) = \exp \left[ \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{(x+1) \ln |H(it)| + t \arg(H(it))}{t^2 + (x+1)^2} dt \right].$$

Появление области деструкции изменяет напряженно-деформированное состояние вблизи вершины трещины, которое теперь будет определяться показателем сингулярности напряжений  $\lambda_d$  ( $-1 < \lambda_d < 0$ ), удовлетворяющим уравнению

$$D_2(-1-x) = 0. \quad (8)$$

**Раскрытие трещины и условия ее страгивания.** При пренебрежении областью деструкции раскрытие трещины в ее вершине, согласно принятым граничным условиям ( $\langle u_\theta(r, \pm\pi) \rangle = 0$ ,  $\langle u_r(r, \alpha) \rangle = 0$ ), равно нулю. Образование же области деструкции приводит к ненулевому сдвиговому смещению берегов в вершине  $\delta$ , равному  $\lim_{x \rightarrow -0} |\langle u \rangle_{y=0}|$  и связанному со скачком касательного смещения  $\langle u_r(0, \alpha) \rangle$  соотношением  $\delta = \langle u_r(0, \alpha) \rangle / \cos \alpha$ . Последний может быть определен из его связи с функцией  $\Phi_1^-(p)$ , полученной в ходе решения задачи:

$$\langle u_r(0, \alpha) \rangle = - \left\langle \frac{\partial u_r}{\partial r} \right\rangle^* \Big|_{p=0, \theta=\alpha} = - \frac{2(1-\nu_1)d}{G_1} \Phi_1^-(0).$$

Используя (7) и условие  $K = 0$ , получим:

$$\delta = - \frac{2(1-\nu_1)}{G_1 \cos \alpha} \frac{d}{\sqrt{\pi H(0)}} \sum_{i=1}^2 \frac{C_i f_{2i} d^{\lambda_i} K^+(1+\lambda_i)}{J_1(\lambda_i)} \frac{\lambda_i}{(1+\lambda_i)^2}.$$

Страгивание трещины произойдет при достижении величиной  $\delta$  некоторого критического значения  $\delta_1$  — предельной вытяжки [14], представляющей собой характеристику прочности первого материала. В предположении малости зоны предразрушения, что является условием приемлемости рассмотренной модели, приравняв  $\delta$  к  $\delta_1$ , можно найти величину разрушающей нагрузки.

**Анализ полученных результатов и выводы.** Проиллюстрируем следствия из полученного решения задачи об области деструкции на примере трещины длиной  $L$ , расположенной на плоской границе раздела кусочно-однородной плоскости, нагруженной на бесконечности сдвигающим напряжением  $q = 0,1\sigma_1$  при  $\nu_1 = \nu_2 = 0,3$ ,  $\mu = -0,35 \div 0$ . При вычислениях длины начальной зоны предразрушения по [1] в указанных условиях нагружения используется выражение для коэффициента интенсивности напряжений  $k_{II}$ , найденное в [11]. Сопротивление сдвигу первого материала было принято равным  $\tau_1 = 5\sigma_1$ , что соответствует его слабой пластичности; при меньших значениях  $\tau_1$  (особенно при  $\tau_1 \leq \sigma_1$ ) длина области деструкции оказывается одного порядка с длиной зоны предразрушения, что нарушает исходные предпосылки задачи ( $d \ll l$ ) и предполагает иной механизм развития зоны предразрушения, а именно, образование более развитой пластической зоны, моделируемой линией разрыва касательного смещения [13], в привершинной части которой существует малая область деструкции, где терпят разрыв и касательное, и нормальное смещения.

Результаты выполненных вычислений приведены в табл. 1. Согласно расчетам, длина области деструкции  $d$ , в отличие от длины зоны предразрушения  $l$ , растет с увеличением коэффициента трения между берегами трещины, что может быть связано с зависимостью от трения наименьшего показателя степени сингулярности напряжений  $\lambda_1$ , характеризующего напряженно-деформированное состояние вблизи вершины трещины после образования зоны предразрушения. Размеры области деструкции, как и зоны предразрушения, растут с увеличением отношения упругих постоянных сред  $G_1/G_2$ , т. е. с увеличением жесткости верхнего материала по отношению к подложке.

Образование области деструкции приводит к ослаблению концентрации напряжений у вершины трещины: наименьший корень  $\lambda_{d1}$  уравнения (8) из интервала  $(-1, 0)$  больше не только наименьшего показателя сингулярности напряжений  $\lambda_1$  после образования зоны предразрушения, но и изначальной степени сингулярности  $\lambda$  до образования обеих зон:  $\lambda_{d1} > \lambda > \lambda_1$ .

Таблица 1

$G_1/G_2$	$\mu$	0	-0,05	-0,1	-0,15	-0,2	-0,25	-0,3	-0,35
0,1	$\alpha^\circ$	67,57	67,37	67,16	66,95	66,75	66,54	66,34	66,14
	$l/L$	$6,19 \cdot 10^{-3}$	$6,06 \cdot 10^{-3}$	$5,94 \cdot 10^{-3}$	$5,83 \cdot 10^{-3}$	$5,73 \cdot 10^{-3}$	$5,64 \cdot 10^{-3}$	$5,56 \cdot 10^{-3}$	$5,51 \cdot 10^{-3}$
	$d/L$	$1,94 \cdot 10^{-4}$	$2,02 \cdot 10^{-4}$	$2,12 \cdot 10^{-4}$	$2,22 \cdot 10^{-4}$	$2,34 \cdot 10^{-4}$	$2,48 \cdot 10^{-4}$	$2,65 \cdot 10^{-4}$	$2,86 \cdot 10^{-4}$
	$\frac{\delta G_1}{L \sigma_1}$	$3,83 \cdot 10^{-3}$	$3,95 \cdot 10^{-3}$	$4,08 \cdot 10^{-3}$	$4,22 \cdot 10^{-3}$	$4,38 \cdot 10^{-3}$	$4,56 \cdot 10^{-3}$	$4,76 \cdot 10^{-3}$	$4,99 \cdot 10^{-3}$
	$\lambda$	-0,5	-0,4963	-0,4926	-0,4888	-0,4851	-0,4814	-0,4777	-0,4740
	$\lambda_1$	-0,8422	-0,8514	-0,8610	-0,8712	-0,8821	-0,8940	-0,9073	-0,9230
	$\lambda_{d1}$	-0,3435	-0,3221	-0,3008	-0,2801	-0,2613	-0,2460	-0,2353	-0,2283
0,9	$\alpha^\circ$	70,33	70,31	70,30	70,28	70,27	70,25	70,24	70,22
	$l/L$	$6,96 \cdot 10^{-3}$	$7,03 \cdot 10^{-3}$	$7,10 \cdot 10^{-3}$	$7,19 \cdot 10^{-3}$	$7,29 \cdot 10^{-3}$	$7,43 \cdot 10^{-3}$	$7,62 \cdot 10^{-3}$	$7,98 \cdot 10^{-3}$
	$d/L$	$2,14 \cdot 10^{-4}$	$2,33 \cdot 10^{-4}$	$2,56 \cdot 10^{-4}$	$2,82 \cdot 10^{-4}$	$3,16 \cdot 10^{-4}$	$3,61 \cdot 10^{-4}$	$4,34 \cdot 10^{-4}$	$6,97 \cdot 10^{-4}$
	$\frac{\delta G_1}{L \sigma_1}$	$7,44 \cdot 10^{-3}$	$8,19 \cdot 10^{-3}$	$9,06 \cdot 10^{-3}$	$1,01 \cdot 10^{-2}$	$1,15 \cdot 10^{-2}$	$1,34 \cdot 10^{-2}$	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$3,25 \cdot 10^{-2}$
	$\lambda$	-0,5	-0,4998	0,4995	-0,4993	-0,4990	-0,4988	-0,4986	-0,4983
	$\lambda_1$	-0,8731	-0,8841	-0,8957	-0,9080	-0,9215	-0,9368	-0,9556	-0,9856
	$\lambda_{d1}$	-0,4880	-0,4875	-0,4871	-0,4867	-0,4864	-0,4861	-0,4858	-0,4855

Таким образом, рассмотренная комплексная модель зоны предразрушения соответствует следующему механизму начального развития межфазной трещины в условиях сдвига. У вершины трещины образуется область контакта берегов и узкая боковая зона предразрушения, в привершинной части которой возникает зона повышенной деформации материала — область деструкции, приводящие к относительному сдвигу вершин верхнего и нижнего берегов — раскрытию трещины. С увеличением нагрузки размеры зоны предразрушения и области деструкции, а также раскрытие трещины растут. При некотором напряжении раскрытие становится равным критическому и происходит страгивание трещины в направлении, определяемом ориентацией зоны предразрушения, а преобладающим механизмом разрушения в рассматриваемой части трещины является сдвиг.

1. Каминский А. А., Дудик М. В., Кипнис Л. А. Влияние трения между берегами межфазной трещины на угол ее начального поворота при сдвиге // Доп. НАН України. – 2013. – № 5. – С. 60–65.
2. Каминский А. А., Нижник С. Б. Исследование закономерностей изменения пластической зоны у края трещины и характеристик трещиностойкости металлических материалов в зависимости от их структуры (обзор) // Прикл. механика. – 1995. – **31**, № 10. – С. 3–27.
3. Каминский А. А., Усикова Г. И., Дмитриева Е. А. Экспериментальное исследование распределения пластических деформаций в окрестности вершины трещины при статическом нагружении // Там же. – 1994. – **30**, № 11. – С. 69–75.
4. Smith E. Some implications of recent developments in plastic fracture mechanics on stress corrosion cracking in engineering materials // Materials Science and Engineering. – 1980. – **44**. – P. 205–211.
5. Tvergaard V., Hutchinson J. W. The influence of plasticity on mixed mode interface toughness // J. Mech. Phys. Solids. – 1993. – **41**, No 6. – P. 1119–1135.
6. Панасюк В. В., Панько І. М. Границна рівновага тіла з тріщиною з урахуванням особливостей розподілу напружень біля її вершини // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 2005. – № 4. – С. 5–8.
7. Каминский А. А., Кипнис Л. А. О комплексной модели зоны предразрушения в конце трещины на границе раздела упругих сред // Доп. НАН України. – 2010. – № 2. – С. 60–64.
8. Каминский А. А., Кипнис Л. А. О страгивании трещины, расположенной на границе раздела упругих сред // Там само. – 2011. – № 1. – С. 38–43.
9. Comninou M. Interface crack with friction in the contact zone // J. Appl. Mech. Brief Notes. – 1977. – **44**. – P. 780–781.
10. Comninou M., Dundurs J. Effect of friction on the interface crack loaded in shear // J. of Elasticity. – 1980. – **10**, No 2. – P. 203–212.



11. *Острик В. И., Улитко А. Ф.* Метод Винера–Хопфа в контактных задачах теории упругости. – Киев: Наук. думка, 2006. – 328 с.
12. *Уфлянд Я. С.* Интегральные преобразования в задачах теории упругости. – Ленинград: Наука, 1967. – 402 с.
13. *Дудик М. В.* Влияние трения берегов межфазной трещины на развитие начальной пластической зоны // Теорет. и прикл. механика. – 2009. – Вып. 46. – С. 81–90.
14. *Бакиров В. Ф., Гольдштейн Р. В.* Модель Леонова–Панасюка–Дагдейла для трещины на границе соединения материалов // Прикл. математика и механика. – 2004. – **68**, вып. 1. – С. 170–179.

*Институт механики им. С. П. Тимошенко  
НАН Украины, Киев  
Уманский государственный педагогический  
университет*

*Поступило в редакцию 21.10.2013*

**А. О. Камінський, М. В. Дудик, Л. А. Кіпніс**

### **Вплив області деструкції матеріалу біля вершини міжфазної тріщини на умови її зрушення**

*В умовах плоскої деформації методом Вінера–Хопфа біля вершини міжфазної тріщини зсуву, береги якої взаємодіють з тертям, в рамках комплексної моделі виконано розрахунок області деструкції у прилеглий до вершини частині початкової зони передруйнування. В області деструкції припускається розрив як нормального, так і дотичного переміщення. Отримано вирази для розрахунку довжини області деструкції та розкриття тріщини. За допомогою деформаційного критерію досліджено вплив зони деструкції на зрушення тріщини. Виявлено, що зрушення тріщини відбувається внаслідок відносного зсуву її берегів біля вершини.*

**A. A. Kaminsky, M. V. Dudyk, L. A. Kipnis**

### **Influence of the process zone at the tip of an interfacial crack on the condition of its advancement**

*The calculation of the process zone in a part of the initial prefracture zone adjacent to the interfacial shear crack tip is executed by the Wiener–Hopf method for the plane strain conditions within a complex model. The crack lips are in contact with friction. The normal and tangential displacement discontinuities in the process zone are assumed. The expressions for the calculation of the process zone length and the crack opening are obtained. The process zone influence on the crack advancement is investigated by the deformation criterion. The fact that the crack advancement is a result of the relative shear of its lips near the tip is discovered.*

## Нестационарная нагрузка на поверхности упругого полупространства

*Рассматривается осесимметричная задача определения напряженно-деформированного состояния упругого полупространства, на границе которого действует нестационарное нормальное напряжение. Решение задачи строится с применением интегральных преобразований Лапласа и Бесселя. Выполнено совместное обращение интегральных преобразований. Как результат, получено точное решение задачи и определено напряжение и перемещение вдоль оси симметрии задачи. Приведен пример числовых расчетов.*

**Формулировка задачи.** Рассматривается упругое полупространство, к поверхности которого приложена нестационарная нагрузка. Имеет место осевая симметрия задачи, поэтому полупространство отнесено к цилиндрической системе координат  $Orz$ , выбранной таким образом, что ось  $Oz$ , являющаяся осью симметрии, направлена вглубь полупространства, ось  $Or$  — вдоль его поверхности (рис. 1).

Нестационарная нагрузка в виде нормального напряжения возникает в некоторый начальный момент времени  $t = 0$  и в общем случае является функцией времени и координаты  $r$ . Физические свойства материала среды описываются при помощи упругих постоянных — модуля всестороннего сжатия  $K$ , модуля сдвига  $\mu$  и плотности  $\gamma$ . Введем в рассмотрение также некоторую “акустическую” среду с параметрами  $E$ ,  $\gamma$  и  $\mu = 0$ , где  $E$  — модуль Юнга. Через  $c_0$  обозначим скорость звука в акустической среде. Таким образом, скорости распространения волн определяются формулами  $c_p = ((K + 4/3\mu)/\gamma)^{1/2}$ ;  $c_s = (\mu/\gamma)^{1/2}$ ;  $c_0 = (E/\gamma)^{1/2}$ .

Вводятся безразмерные переменные и обозначения:

$$\begin{aligned} \bar{r} &= \frac{r}{R}, & \bar{z} &= \frac{z}{R}, & \bar{\sigma}_{ij} &= \frac{\sigma_{ij}}{E} & (i, j = r, z), & \bar{u}_i &= \frac{u_i}{R}, \\ \bar{t} &= \frac{c_0 t}{R}, & \beta &= \frac{c_s}{c_0}, & \alpha &= \frac{c_p}{c_0}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $R$  — некоторый характерный линейный размер;  $u_i$  — проекции вектора упругих перемещений;  $\sigma_{ij}$  — компоненты тензора напряжений. Ниже (если не будет оговорено иное) будут использоваться только безразмерные обозначения, поэтому черту над ними опускаем.

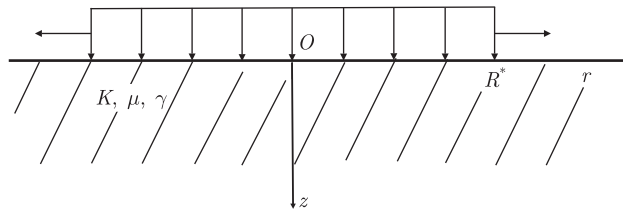


Рис. 1. Система координат

Движение упругой среды в осесимметричном случае описывается двумя скалярными волновыми потенциалами  $\Phi$  и  $\Psi$ , удовлетворяющими уравнениям [2]

$$\Delta\Phi = \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2}; \quad \Delta\Psi = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}; \quad \Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (2)$$

Физические величины (перемещения, напряжения) выражаются через потенциалы  $\Phi$  и  $\Psi$  следующим образом:

$$\begin{aligned} u_r &= \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r \partial z}; & u_z &= \frac{\partial \Phi}{\partial z} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r}; \\ \sigma_{zz} &= \left(1 - 2\frac{\beta^2}{\alpha^2}\right) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} + 2\beta^2 \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} - \frac{\partial^3 \Psi}{\partial r^2 \partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r \partial z}\right); \\ \sigma_{rr} &= \left(1 - 2\frac{\beta^2}{\alpha^2}\right) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} + 2\beta^2 \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \frac{\partial^3 \Psi}{\partial r^2 \partial z}\right); \\ \sigma_{rz} &= 2\beta^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial z} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} - \frac{1}{2\beta^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}\right). \end{aligned}$$

Граничные условия на поверхности  $z = 0$  состоят в задании нормального напряжения  $\sigma_{zz}$  и отсутствии касательного напряжения

$$\begin{aligned} \sigma_{zz}|_{z=0} &= Q(t, r), \\ \sigma_{zr}|_{z=0} &= 0, \quad r \geq 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $Q(t, r)$  — заданная функция. Начальные условия для потенциалов  $\Phi$  и  $\Psi$  являются нулевыми

$$\Phi|_{t=0} = \dot{\Phi}|_{t=0} = \Psi|_{t=0} = \dot{\Psi}|_{t=0} = 0, \quad (4)$$

на бесконечности волновые возмущения затухают.

**Общее решение.** Решение задачи (1)–(4) получим при помощи интегральных преобразований Лапласа по времени  $t$  с параметром  $s$  и преобразования Бесселя (Ханкеля) порядка 0 по  $r$  с параметром  $\xi$  [6]. В частности,

$$\begin{aligned} f^L(s) = L\{f(t)\} &= \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt; & f(t) = L^{-1}\{f^L(s)\} &= \frac{1}{2\pi} \int_{\delta-i\infty}^{\delta+i\infty} e^{ts} f^L(p) dp; \\ f^B(\xi) = B\{f(r)\} &= \int_0^\infty f(r) r J_0(r\xi) d\xi; & f(r) = B^{-1}\{f^B(\xi)\} &= \int_0^\infty f^B(\xi) \xi J_0(r\xi) d\xi. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь через  $L$  и  $B$ , соответственно, обозначены операторы интегральных преобразований Лапласа и Бесселя;  $L^{-1}$ ,  $B^{-1}$  — операторы обращения, изображение функции обозначается соответствующим верхним индексом;  $J_m$  — цилиндрическая функция Бесселя индекса  $m$  [3].

В пространстве изображений по Лапласу и Бесселю получим следующую граничную задачу (в которой начальные условия уже реализованы):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \Phi^{LB}}{\partial z^2} - \left( \frac{s^2}{\alpha^2} + \xi^2 \right) \Phi^{LB} &= 0, \\
\frac{\partial^2 \Psi^{LB}}{\partial z^2} - \left( \frac{s^2}{\beta^2} + \xi^2 \right) \Psi^{LB} &= 0, \\
\left( 1 - 2 \frac{\beta^2}{\alpha^2} \right) s^2 \Phi^{LB} + 2\beta^2 \left[ \frac{\partial^2 \Phi^{LB}}{\partial z^2} + \xi^2 \frac{\partial}{\partial z} \Psi^{LB} \right] &= Q^{LB}(s, \xi), \quad z = 0, \\
\frac{\partial \Phi^{LB}}{\partial z} + \frac{\partial^2 \Psi^{LB}}{\partial z^2} - \frac{s^2}{2\beta^2} \Psi^{LB} &= 0, \quad z = 0, \\
\Phi^{LB} \rightarrow 0, \quad \Psi^{LB} \rightarrow 0, \quad z &\rightarrow \infty.
\end{aligned} \tag{6}$$

Общее решение волновых уравнений, затухающее при  $z \rightarrow \infty$ , имеет вид

$$\Phi^{LB} = A e^{-\frac{z}{\alpha} \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2}}; \quad \Psi^{LB} = B e^{-\frac{z}{\beta} \sqrt{s^2 + \beta^2 \xi^2}}. \tag{7}$$

Определяя произвольные постоянные  $A, B$  из граничных условий, будем иметь выражение для изображения нормального напряжения

$$\begin{aligned}
\sigma_{zz}^{LB}(s, \xi, z) &= Q^{LB}(s, \xi) \times \\
&\times \frac{(s^2 + 2\beta^2 \xi^2)^2 e^{-\frac{z}{\alpha} \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2}} - 4 \frac{\beta^3}{\alpha} \xi^2 \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2} \sqrt{s^2 + \beta^2 \xi^2} e^{-\frac{z}{\beta} \sqrt{s^2 + \beta^2 \xi^2}}}{(s^2 + 2\beta^2 \xi^2)^2 - 4 \frac{\beta^3}{\alpha} \xi^2 \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2} \sqrt{s^2 + \beta^2 \xi^2}}.
\end{aligned} \tag{8}$$

Перемещение  $u_z$  и напряжение сдвига  $\sigma_{rz}$  в изображениях имеют вид

$$u_z^{LB} = -Q^{LB}(s, \xi) \frac{\frac{1}{\alpha} \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2} \left[ (s^2 + 2\beta^2 \xi^2) e^{-\frac{z}{\alpha} \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2}} - 2\beta^2 \xi^2 e^{-\frac{z}{\beta} \sqrt{s^2 + \beta^2 \xi^2}} \right]}{(2\beta^2 \xi^2 + s^2)^2 - 4 \frac{\beta^3}{\alpha} \xi^2 \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2} \sqrt{s^2 + \beta^2 \xi^2}}, \tag{9}$$

$$\sigma_{rz}^{LB} = -Q^{LB}(s, \xi) \frac{\frac{1}{\alpha} (s^2 + 2\beta^2 \xi^2) \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2} \left( e^{-\frac{z}{\alpha} \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2}} - e^{-\frac{z}{\beta} \sqrt{s^2 + \beta^2 \xi^2}} \right)}{(2\beta^2 \xi^2 + s^2)^2 - 4 \frac{\beta^3}{\alpha} \xi^2 \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2} \sqrt{s^2 + \beta^2 \xi^2}}. \tag{10}$$

**Обращение интегральных преобразований.** Обратим внимание на то обстоятельство, что дробь в выражениях (8)–(10) является однородной функцией параметров преобразований  $s$  и  $\xi$ . Это позволяет надеяться, что для некоторых внешних воздействий, которые задают функцию  $Q^{LB}(s, \xi)$ , можно получить аналитическое выражение для  $\sigma_{zz}$ ,  $\sigma_{rz}$ ,  $u_z^{LB}$  на основе метода Каньяра [4, 5] совместного обращения интегральных преобразований.

Методика обращения зависит от свойств функции  $Q(r, t)$ , поэтому ее необходимо конкретизировать. В рамках данной публикации ограничимся нагрузкой следующего вида:

$$Q(t, x) = Q_0 H(kt - r), \tag{11}$$

где  $H(t)$  — единичная функция Хевисайда:  $H(t) = \begin{cases} 1, & t > 0; \\ 0, & t < 0 \end{cases}$ . Функция (11) задает внезапно возникающее и распространяющееся с постоянной скоростью по поверхности полупространства напряжение.

Нетрудно определить преобразование Лапласа и Бесселя этой функции

$$Q_{zz}^L(r, s) = Q_0 \frac{1}{s} e^{-s \frac{r}{k}}; \quad Q_{zz}^{LB}(s, \xi) = Q_0 \frac{k^2}{(s^2 + \xi^2 k^2)^{\frac{3}{2}}}. \quad (12)$$

Тогда, например, из (8) получим

$$\begin{aligned} \sigma_{zz}^{LB}(s, \xi, z) &= Q_0 \frac{k^2}{(s^2 + \xi^2 k^2)^{\frac{3}{2}}} \times \\ &\times \frac{(s^2 + 2\beta^2 \xi^2)^2 e^{-\frac{z}{\alpha} \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2}} - 4 \frac{\beta^3}{\alpha} \xi^2 \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2} \sqrt{s^2 + \beta^2 \xi^2} e^{-\frac{z}{\beta} \sqrt{s^2 + \beta^2 \xi^2}}}{(s^2 + 2\beta^2 \xi^2)^2 - 4 \frac{\beta^3}{\alpha} \xi^2 \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2} \sqrt{s^2 + \beta^2 \xi^2}}. \end{aligned}$$

Запишем инверсию преобразования Бесселя на оси  $z$ , т. е. при  $r = 0$

$$\begin{aligned} \sigma_{zz}^L(s, z) &= Q_0 \int_0^\infty \frac{k^2}{(s^2 + \xi^2 k^2)^{\frac{3}{2}}} \times \\ &\times \frac{\left[ (s^2 + 2\beta^2 \xi^2)^2 e^{-\frac{z}{\alpha} \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2}} - 4 \frac{\beta^3}{\alpha} \xi^2 \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2} \sqrt{s^2 + \beta^2 \xi^2} e^{-\frac{z}{\beta} \sqrt{s^2 + \beta^2 \xi^2}} \right]}{(s^2 + 2\beta^2 \xi^2)^2 - 4 \frac{\beta^3}{\alpha} \xi^2 \sqrt{s^2 + \alpha^2 \xi^2} \sqrt{s^2 + \beta^2 \xi^2}} \xi d\xi \end{aligned}$$

и сделаем замену переменного  $\xi = s\eta$ ,  $d\xi = sd\eta$ , предполагая  $s$  вещественным. Будем иметь

$$\begin{aligned} \sigma_{zz}^L(s, z) &= Q_0 \frac{1}{s} \int_0^\infty \frac{k^2}{(1 + \eta^2 k^2)^{\frac{3}{2}}} \times \\ &\times \frac{\left[ (1 + 2\beta^2 \eta^2)^2 e^{-s \frac{z}{\alpha} \sqrt{1 + \alpha^2 \eta^2}} - 4 \frac{\beta^3}{\alpha} \eta^2 \sqrt{1 + \alpha^2 \eta^2} \sqrt{1 + \beta^2 \eta^2} e^{-s \frac{z}{\beta} \sqrt{1 + \beta^2 \eta^2}} \right]}{(1 + 2\beta^2 \eta^2)^2 - 4 \frac{\beta^3}{\alpha} \eta^2 \sqrt{1 + \alpha^2 \eta^2} \sqrt{1 + \beta^2 \eta^2}} \eta d\eta. \quad (13) \end{aligned}$$

Перепишем (13) в виде суммы двух интегралов

$$\begin{aligned} \sigma_{zz}^L(s, z) &= Q_0 \frac{1}{s} [R_1^L(z, s) + R_2^L(z, s)] = Q_0 \frac{1}{s} \left[ \int_0^\infty \bar{R}_1^L(s, z, \eta) d\eta + \int_0^\infty \bar{R}_2^L(s, z, \eta) d\eta \right], \\ \bar{R}_1^L(s, z, \eta) &= e^{-s \frac{z}{\alpha} \sqrt{1 + \alpha^2 \eta^2}} \frac{k^2}{(1 + \eta^2 k^2)^{\frac{3}{2}}} \frac{(1 + 2\beta^2 \eta^2)^2}{(1 + 2\beta^2 \eta^2)^2 - 4 \frac{\beta^3}{\alpha} \eta^2 \sqrt{1 + \alpha^2 \eta^2} \sqrt{1 + \beta^2 \eta^2}} \eta, \quad (14) \\ \bar{R}_2^L(s, z, \eta) &= -4 \frac{\beta^3}{\alpha} e^{-s \frac{z}{\beta} \sqrt{1 + \beta^2 \eta^2}} \frac{k^2}{(1 + \eta^2 k^2)^{\frac{3}{2}}} \frac{\eta^2 \sqrt{1 + \alpha^2 \eta^2} \sqrt{1 + \beta^2 \eta^2}}{(1 + 2\beta^2 \eta^2)^2 - 4 \frac{\beta^3}{\alpha} \eta^2 \sqrt{1 + \alpha^2 \eta^2} \sqrt{1 + \beta^2 \eta^2}} \eta. \end{aligned}$$

В выражении (14) сделаем следующие замены переменного:

$$\begin{aligned} \text{для } \bar{R}_1^L(s, z, \eta): \quad & \frac{z}{\alpha} \sqrt{1 + \alpha^2 \eta^2} = t; \\ \text{для } \bar{R}_2^L(s, z, \eta): \quad & \frac{z}{\beta} \sqrt{1 + \beta^2 \eta^2} = t. \end{aligned}$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} R_1^L(s, z) &= \int_{\frac{z}{\alpha}}^{\infty} e^{-st} \bar{R}_{zz}^{(1)}(t, z) dt; \\ R_1(t, z) &= \frac{\alpha^3 k^2 [\alpha^2 z^2 + 2\beta^2 A(t, z)]^2 t z}{[\alpha^2 z^2 + k^2 A(t, z)]^{\frac{3}{2}} ([\alpha^2 z^2 + 2\beta^2 A(t, z)]^2 - 4\alpha\beta^3 t A(t, z) \sqrt{\alpha^2 z^2 + \beta^2 A(t, z)})}, \\ R_2^L(s, z) &= \int_{\frac{z}{\beta}}^{\infty} e^{-st} \bar{R}_{zz}^{(2)}(t, z) dt; \\ R_2(z, t) &= 4 \frac{\beta^4 k^2}{\alpha} \frac{B(t, z) \sqrt{\beta^2 z^2 + \alpha^2 B(t, z)} t^2 z}{[\beta^2 z^2 + k^2 B(t, z)]^{\frac{3}{2}} [(2\beta^2 t^2 - z^2)^2 - 4 \frac{\beta}{\alpha} t B(t, z) \sqrt{\beta^2 z^2 + \alpha^2 B(t, z)}]}, \\ A(t, z) &= \alpha^2 t^2 - z^2; \quad B(t, z) = \beta^2 t^2 - z^2. \end{aligned} \tag{15}$$

Интегральные операторы в (15) есть операторы преобразования Лапласа, следовательно, оригиналами  $R_1^L(s, z)$  и  $R_2^L(s, z)$  есть, соответственно,  $H(t - z/\alpha)R_1(t, z)$  и  $H(t - z/\beta) \times R_2(z, t)$ .

Окончательно, учитывая множитель  $1/s$  в выражении (14), будем иметь следующее аналитическое выражение для нормального напряжения  $\sigma_{zz}(t, z)$  на оси симметрии задачи:

$$\sigma_{zz}(t, z) = Q_0 \left[ H\left(t - \frac{z}{\alpha}\right) \int_{\frac{z}{\alpha}}^t R_1(\tau, z) d\tau - H\left(t - \frac{z}{\beta}\right) \int_{\frac{z}{\beta}}^t R_2(\tau, z) d\tau \right]. \tag{16}$$

Выражения для остальных напряжений и перемещений получаются аналогично.

**Числовые результаты.** Приведем некоторые числовые результаты, в частности, для напряжения  $\sigma_{zz}$ . При вычислениях были выбраны следующие значения параметров материала упругого полупространства:  $\alpha = 1,28$ ,  $\beta = 0,69$ , кроме того, параметр нагрузки  $Q_0 = 1$ .

На рис. 2, а, б скорость расширения нагрузки такова, что  $\bar{k} = k/\alpha = 1$ .

На рис. 2, а представлено распределение напряжения вдоль оси  $z$  в фиксированные моменты времени:

$$1 - t = 1,0; \quad 2 - t = 5,0; \quad 3 - t = 10,0; \quad 4 - t = 15,0.$$

Можно видеть, что напряжение, оставаясь равным единице на поверхности полупространства, с течением времени и с ростом расстояния от граничной поверхности изменяет

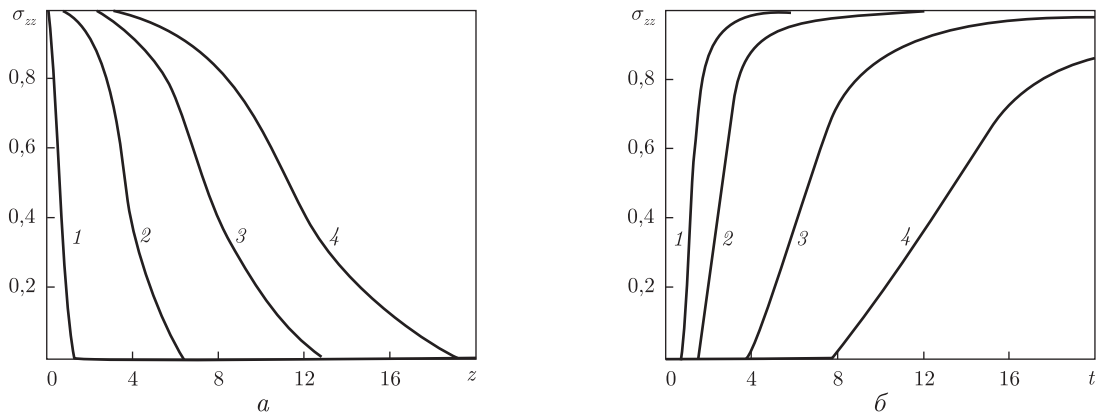


Рис. 2. Напряжение  $\sigma_{zz}$  при  $k = 1$

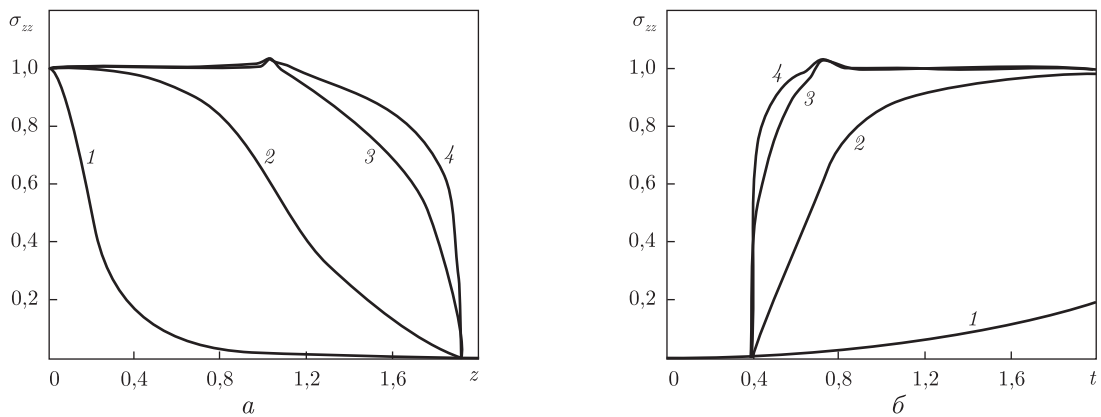


Рис. 3. Напряжение  $\sigma_{zz}$  при различных  $k$

профиль таким образом, что его крутизна уменьшается. При этом увеличивается зона, в которой значение напряжения близко к значению на границе. Рис. 2, б иллюстрирует развитие напряжения во времени в нескольких точках оси  $z$ :

$$1 - z = 1,0; \quad 2 - z = 2,0; \quad 3 - z = 5,0; \quad 4 - z = 10,0.$$

С ростом  $z$  нарастание напряжения в рассматриваемой точке становится все менее резким, а время достижения значения, близкого к значению на границе, увеличивается.

Рис. 3, а, б построены для нескольких значений безразмерного параметра  $k$ : 1 —  $k = 0,1$ ; 2 —  $k = 1,0$ ; 3 —  $k = 5,0$ ; 4 —  $k = 10,0$ . При этом рис. 3, а показывает напряжение  $\sigma_{zz}$  как функцию  $z$  в момент времени  $t = 1,5$ , рис. 3, б — как функцию  $t$  в точке  $z = 0,5$ .

Как следует из графиков, характер изменения напряжения существенно зависит от скорости распространения нагрузки. С уменьшением параметра  $k$  градиент роста напряжения уменьшается. Наблюдаемый на рис. 3, а, б (кривые 3, 4) излом отвечает фронту порожденной сдвиговой волны и имеет место только при движении нагрузки по поверхности полупространства с опережением фронта волны расширения.

Укажем, что решение аналогичной плоской задачи изложено в работе [7].

1. Снеддон И. Н., Берри Д. С. Классическая теория упругости. – Москва: ГИФМЛ, 1961. – 220 с.

2. Гузь А. Н., Кубенко В. Д., Черевко М. А. Дифракция упругих волн. – Киев: Наук. думка, 1978. – 308 с.
3. Бейтмен Г., Эрдейи А. Таблицы интегральных преобразований в 2-х т. Т. 1. Преобразования Фурье, Лапласа, Меллина. – Москва: Наука, ГИФМЛ, 1969. – 344 с.
4. Sagniard L. Reflexion et Refraction des Ondes Seismiques Progressives. – Paris: Gauthier-Villars, 1939. – 255 p.
5. Слепян Л. И. Нестационарные упругие волны. – Ленинград: Судостроение, 1972. – 374 с.
6. Диткин В. А., Прудников А. П. Интегральные преобразования и операционное исчисление. – Москва: ГИФМЛ, 1961. – 524 с.
7. Кубенко В. Д. Нестационарная нагрузка на поверхности упругой полуплоскости // Доп. НАН України. – 2011. – № 10. – С. 67–71.

Институт механики им. С. П. Тимошенко  
НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 25.11.2013

Академік НАН України **В. Д. Кубенко**

### **Нестационарное навантаження на поверхні пружного півпростору**

*Розглядається вісесиметрична задача визначення напруженого стану пружного півпростору, на границі якого діє нестационарне нормальне напруження. Розв'язок задачі будується із застосуванням інтегральних перетворень Лапласа і Бесселя. Виконано спільне обернення інтегральних перетворень. Як результат, одержано точний розв'язок задачі і визначено напруження і переміщення вздовж осі симетрії задачі. Наведено приклад числового розрахунку.*

Academician of the NAS of Ukraine **V. D. Kubenko**

### **Nonstationary loading at the elastic half-space surface**

*A nonstationary stress is applied to the surface of an elastic half-space. It is necessary to build a solution of the transient boundary problem and to determine the stress-strain state of the half-space. The solution is realized with help of the Laplace and Fourier integral transformations. The coupled inversion of the integral transforms is realized. As a result, the exact solution for a stress and a displacement along the axis of symmetry of the problem is determined. Numerical examples are given.*



## Об устойчивости траекторий множества разностных уравнений

*Для множества разностных уравнений, генерируемых дискретизацией множества дифференциальных уравнений с производной Хукухары, установлен принцип сравнения с матричной функцией Ляпунова и достаточные условия устойчивости определенного типа. Анализ проведен на основе матричной функции Ляпунова специальной структуры.*

Далее понадобятся следующие понятия и результаты (см. [1] и библиографию там). Пусть  $K_C(\mathbb{R}^q)$  обозначает семейство всех непустых, компактных и выпуклых подмножеств в пространстве  $\mathbb{R}^q$ ;  $K(\mathbb{R}^q)$  содержит все непустые компактные подмножества в  $\mathbb{R}^q$  и  $C(\mathbb{R}^q)$  — подмножество всех непустых замкнутых подмножеств в  $\mathbb{R}^q$ . Расстояние между непустыми замкнутыми подмножествами  $A$  и  $B$  пространства  $\mathbb{R}^q$  определяется формулой

$$D[A, B] = \max\{d_H(A, B), d_H(B, A)\},$$

где  $d_H(B, A) = \sup\{d(b, A) : b \in B\}$  — хаусдорфово разделение множеств  $A$  и  $B$  и  $d(b, A) = \inf\{\|b - a\| : a \in A\}$  — расстояние от точки  $b$  до множества  $A$ ;  $\|\cdot\|$  — евклидова метрика.

Пара  $(C(\mathbb{R}^q), D)$  является полным сепарабельным метрическим пространством, в котором  $K(\mathbb{R}^q)$  и  $K_C(\mathbb{R}^q)$  — замкнутые подмножества.

Пусть  $F$  — отображение области  $Q$  пространства  $\mathbb{R}^q$  в метрическое пространство  $(K_C(\mathbb{R}^q), D)$ , т. е.  $F: Q \rightarrow K_C(\mathbb{R}^q)$ , что эквивалентно включению  $F(t) \in K_C(\mathbb{R}^q)$  при всех  $t \in Q$ . Такие отображения называются многозначными отображениями  $Q$  в  $\mathbb{R}^q$ .

Пусть  $\mathbb{N}$  обозначает множество натуральных чисел и  $\mathbb{N}_+ = \mathbb{N} \cup \{0\}$ . Обозначим через  $\mathbb{N}_{n_0}$  множество

$$\mathbb{N}_{n_0} = \{n_0, n_0 + 1, \dots, n_0 + k, \dots\},$$

где  $k \in \mathbb{N}$  и  $n_0 \in \mathbb{N}_+$ .

Напомним один результат из теории классических разностных уравнений, который понадобится ниже.

**Теорема 1** (см. [2]). Пусть  $n \in \mathbb{N}_+$  и для любых  $r \geq 0$  функция  $g(n, r)$ ,  $g: \mathbb{N}_+ \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ , неубывающая по  $r$  при каждом значении  $n$ . Если при любом  $n \geq n_0$  выполняются неравенства  $y_n \geq 0$  и

$$y_{n+1} \leq g(n, y_n),$$

$$z_{n+1} \geq g(n, z_n),$$

то  $y_n \leq z_n$  при всех  $n \geq n_0$ , как только  $y_{n_0} \leq z_{n_0}$ .

**Следствие 1.** Если в условиях теоремы 1 функция  $g(n, r)$  имеет вид  $g(n, r) = r + w(n, r)$ , где  $\lim_{\|r\| \rightarrow 0} \frac{\|w(n, r)\|}{\|r\|} = 0$  при  $\|r\| \rightarrow 0$ , то утверждение теоремы 1 сохраняется.

**Постановка задачи.** Рассмотрим множество разностных уравнений в форме

$$X_{n+1} = F(n, X_n, \alpha), \quad X_{n_0} = X_0, \quad (1)$$

где отображение  $F: \mathbb{N}_+ \times K_C(\mathbb{R}^q) \rightarrow K_C(\mathbb{R}^q)$  является непрерывным по  $X_n$  при каждом  $n$  и  $X_n \in K_C(\mathbb{R}^q)$  при всех  $n \geq n_0$ ,  $\alpha \in \mathfrak{S} \subset \mathbb{R}^d$  — параметр неточности.

Наряду с системой (1) будем рассматривать следующие множества разностных уравнений:

$$X_{n+1} = F_M(n, X_n), \quad X_{n_0} = X_0, \quad (2)$$

где  $F_M(n, X_n) = \overline{\text{co}} \bigcup_{\alpha \in \mathfrak{S}} F(n, X_n, \alpha)$ ;

$$X_{n+1} = F_m(n, X_n), \quad X_{n_0} = X_0, \quad (3)$$

где  $F_m(n, X_n) = \overline{\text{co}} \bigcap_{\alpha \in \mathfrak{S}} F(n, X_n, \alpha)$ ;

$$X_{n+1} = F_\beta(n, X_n), \quad X_{n_0} = X_0, \quad (4)$$

где  $F_\beta(n, X_n) = F_M(n, X_n)\beta + F_m(n, X_n)(1 - \beta)$ ,  $\beta \in [0, 1]$ .

Заметим, что произведение скаляра  $\beta$  на множество  $A$  определяется формулой  $C = \beta A = \{c = \beta a : a \in A\}$ .

Здесь и далее предполагается, что  $F_m$ ,  $F_M$  и  $F_\beta \in K_c(\mathbb{R}^q)$  и символ  $\overline{\text{co}}$  обозначает замыкание выпуклой оболочки соответствующего множества. Необходимо получить условия устойчивости стационарного решения  $\Theta \in K_C(\mathbb{R}^q)$  множества систем разностных уравнений (1) на основе функции Ляпунова, построенной для уравнений (2)–(4).

**Структура матричной вспомогательной функции.** Введем вспомогательную функцию

$$U(n, \beta, X_n) = [U_{ij}(n, \beta, X_n)], \quad i, j = 1, 2, \quad (5)$$

где элемент  $U_{11}(n, X_n)$  связан с множеством уравнений (2), элемент  $U_{22}(n, X_n)$  связан с множеством уравнений (3), элемент  $U_{12}(n, \beta, X_n) = U_{21}(n, \beta, X_n)$  связан с множеством уравнений (4).

На основе функции (5) построим скалярную функцию

$$V(n, X_n, \beta, \theta) = \theta^T U(n, \beta, X_n) \theta, \quad \theta \in \mathbb{R}_+^2 \setminus \{0\} \quad (6)$$

и предположим, что  $V: \mathbb{N}_+ \times K_C(\mathbb{R}^q) \times [0, 1] \times \mathbb{R}_+^2 \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{R}_+$ .

Функция (6) является функцией Ляпунова для множества уравнений (1), если вместе с первой разностью

$$\Delta V(n, X_n, \beta, \theta) = V(n+1, X_{n+1}, \beta, \theta) - V(n, X_n, \beta, \theta) \quad (7)$$

с ее помощью может быть решен вопрос об устойчивости стационарного решения  $\Theta \in K_C(\mathbb{R}^q)$  множества уравнений (1).

Наряду с множеством разностных уравнений (1) будем рассматривать скалярное уравнение сравнения

$$u_{n+1} = g(n, u_n), \quad u_{n_0} = u_0, \quad (8)$$

которое связано с функцией (6) и первой разностью (7). Здесь функция  $g(n, r)$  — непрерывная и неубывающая по  $r$  при каждом значении  $n \in \mathbb{N}_+$  функция,  $g(n, 0) = 0$  при всех  $n \in \mathbb{N}_+$ .

**Теорема 2.** Пусть для множества уравнений (1) построена функция (6) и для первой разности (7) верна оценка

$$\Delta V(n, X_n, \beta, \theta)|_{(1)} \leq w(n, V(n, X_n, \beta, \theta)), \quad (9)$$

где  $w(n, r)$  удовлетворяет условию следствия 1 при всех  $n \in \mathbb{N}_+$ . Тогда, если  $V(n_0, X_{n_0}, \beta, \theta) \leq u_{n_0}$ , то  $V(n+1, X_{n+1}, \beta, \theta) \leq u_{n+1}$  при всех  $n \in \mathbb{N}_+$ .

**Доказательство.** Обозначим  $u_{n+1} = V(n+1, X_{n+1}, \beta, \theta)$ . По условию теоремы 2,  $V(n_0, X_{n_0}, \beta, \theta) \leq u_{n_0}$  и, кроме того,

$$u_{n+1} \leq u_n + w(n, u_n) \quad \text{при всех} \quad n \geq n_0.$$

Следовательно, в уравнении сравнения (8)  $g(n, r) = r + w(n, r)$  и, согласно следствию 1, имеем оценку  $V(n+1, X_{n+1}, \beta, \theta) \leq u_{n+1}$  при всех  $n \geq n_0$ . Этим теорема 2 доказана.

**Достаточные условия устойчивости стационарного решения уравнений (1).**

Напомним, что для множеств  $X_0, Y_0 \in K_C(\mathbb{R}^q)$  множество  $W_0 \in K_C(\mathbb{R}^q)$  называется разностью Хукухары, если  $X_0 = Y_0 + W_0$ . Для множества уравнений (1) введем такие предположения:

1. Для уравнений (1) существует множество стационарных решений  $\Theta_0 \in K_C(\mathbb{R}^q)$ , т. е.  $F(n, \Theta_0) = \Theta_0$  при всех  $n \in \mathbb{N}_+$ .

2. Существует множество  $Y_0 \in K_C(\mathbb{R}^q)$  такое, что для любого  $X_0 \in K_C(\mathbb{R}^q)$  существует разность Хукухары  $W_0$ .

**Определение 1.** Стационарное решение  $\Theta_0$  множества уравнений (1) является:

а) устойчивым, если для  $n_0 \in \mathbb{N}_+$  и  $\varepsilon > 0$  существует  $\delta = \delta(n_0, \varepsilon) > 0$  такое, что из неравенства  $D[W_0, \Theta_0] < \delta$  следует оценка  $D[X(n), \Theta_0] < \varepsilon$  при всех  $n \geq n_0$ , где  $W_0$  — разность Хукухары для начальных значений  $X_0 \in K_C(\mathbb{R}^q)$ ;

б) притягивающим, если для  $n_0 \in \mathbb{N}_+$  существует  $\alpha(n_0) > 0$  и для любого  $\xi > 0$  существует  $\tau(n_0, W_0, \xi) \in \mathbb{N}_+$  такое, что из неравенства  $D[W_0, \Theta_0] < \alpha(n_0)$  следует оценка  $D[X(n), \Theta_0] < \xi$  при любом  $n \geq n_0 + \tau(n_0, W_0, \xi)$ ;

в) асимптотически устойчивым, если оно устойчиво и притягивающее одновременно.

Для множества разностных уравнений (1) имеет место следующее утверждение.

**Теорема 3.** Предположим, что для множества разностных уравнений (1) существуют

а) функция (6), постоянные симметрические  $(2 \times 2)$ -матрицы  $A(\theta)$ ,  $B(\theta)$  и векторные функции сравнения  $(\phi_1, \phi_2) \in KR$ -классу Хана такие, что

$$\phi_1^T(\|X_n\|)A(\theta)\phi_1(\|X_n\|) \leq V(n, X_n, \beta, \theta) \leq \phi_2^T(\|X_n\|)B(\theta)\phi_2(\|X_n\|) \quad (10)$$

$$\text{при всех} \quad \beta \in [0, 1], \quad X_n \in K_C(\mathbb{R}^q) \quad \text{и} \quad \theta \in \mathbb{R}_+^2 \setminus \{0\};$$

б) функция  $w(n, r)$ , указанная в следствии 1, и выполняется оценка (9) при всех  $\beta \in [0, 1]$  и всех  $n \in \mathbb{N}_+$ .

Тогда, если матрицы  $A(\theta)$  и  $B(\theta)$  определенно положительные, то стационарное решение  $\Theta_0 \in K_C(\mathbb{R}^q)$  множества разностных уравнений (1) обладает теми же динамическими свойствами, что и нулевое решение уравнения сравнения (8).

**Доказательство.** Пусть  $\lambda_m(A)$  и  $\lambda_M(B)$  — минимальное и максимальное собственные значения матриц  $A$  и  $B$  соответственно. Оценку (10) преобразуем к виду

$$\lambda_m(A)b(\|X_n\|) \leq V(n, X_n, \beta, \theta) \leq \lambda_M(B)a(\|X_n\|),$$

где  $a, b \in KR$ -классу Хана такие, что

$$\phi_1^T(\|X_n\|)\phi_1(\|X_n\|) \geq b(\|X_n\|) \quad \text{и} \quad \phi_2^T(\|X_n\|)\phi_2(\|X_n\|) \leq a(\|X_n\|)$$

при всех  $X_n \in K_C(\mathbb{R}^q)$  и  $n \in \mathbb{N}_+$ .

Далее предположим, что нулевое решение уравнения сравнения (8) асимптотически устойчиво. Пусть заданы  $n_0 \in \mathbb{N}_+$  и  $\varepsilon \in (0, H)$ ,  $H = \text{const} > 0$ . При этом для величин  $\lambda_m(A)b(\varepsilon) > 0$  и  $n_0 \in \mathbb{N}_+$  найдется  $\delta_1 = \delta_1(n_0, \varepsilon) > 0$  такое, что если  $0 < u_{n_0} < \delta_1$ , то  $u_{n+1} < \lambda_m(A)b(\varepsilon)$  при всех  $n \geq n_0$ . Далее выберем величину  $\delta = \delta(n_0, \varepsilon) > 0$  из условия  $\lambda_M(B)a(\delta) < \delta_1(n_0, \varepsilon)$ . Согласно теореме 2, имеем оценку

$$V(n+1, X_{n+1}, \beta, \theta) \leq u_{n+1} \quad \text{при всех} \quad n \geq n_0$$

и вследствие неравенства (11) получим

$$\lambda_m(A)b(D[X_{n+1}, \Theta_0]) \leq V(n+1, X_{n+1}, \beta, \theta) \leq u_{n+1} \quad \text{при всех} \quad n \geq n_0.$$

Пусть начальные значения  $X_0 \in K_C(\mathbb{R}^q)$  и  $D[X_0, \Theta_0] < \delta$ . Выберем  $u_{n_0} = V(n_0, X_0, \beta, \theta)$ . Тогда нетрудно видеть, что

$$u_{n_0} \leq \lambda_M(B)a(D[X_0, \Theta_0]) \leq \lambda_M(B)a(\delta) < \delta_1.$$

Отсюда следует, что

$$\lambda_m(A)b(D[X_{n+1}, \Theta_0]) \leq \lambda_m(A)b(\varepsilon) \quad \text{при всех} \quad n \geq n_0,$$

и, следовательно,  $D[X_{n+1}, \Theta_0] < \varepsilon$  при всех  $n \geq n_0$ . Далее из оценки

$$\lambda_m(A)b(D[X_{n+1}, \Theta_0]) \leq V(n+1, X_{n+1}, \beta, \theta) \leq u_{n+1} \quad \text{при} \quad n \geq n_0$$

следует, что для начальных условий  $X_0 \in K_C(\mathbb{R}^q)$  имеет место  $D[X_{n+1}, \Theta_0] \rightarrow 0$  при  $n \rightarrow \infty$ , как только  $u_{n+1} \rightarrow 0$  при  $n \rightarrow \infty$ .

Это завершает доказательство теоремы 3.

**Заключительные замечания.** Разностные уравнения имеют широкое применение в теории вероятностей, теории массового обслуживания, в теории стохастических степенных рядов, теории чисел, теории электрических сетей, экономике, экологии и при исследовании других явлений реального мира. В то время как общая теория устойчивости классических разностных уравнений развита достаточно полно (см. [3, 4] и библиографию там), теория множества разностных уравнений находится на начальной стадии создания. В данной работе излагается один общий подход к проблеме анализа устойчивости множества траекторий разностных уравнений на основе обобщенного прямого метода Ляпунова.

В тех случаях, когда для уравнения сравнения (8) условия устойчивости могут быть получены в явном виде, теоремой 3 эффективно решается вопрос об устойчивости стационарного решения  $\Theta_0$  множества разностных уравнений (1).

1. *Bhaskar T. G., Shaw M.* Stability results for set difference equations // *Dynamic Systems and Applications*. – 2004. – **13**, No 3/4. – P. 479–485.
2. *Lakshmikantham V., Leela S., Martynyuk A. A.* Stability analysis of nonlinear systems. – New York: Marcel Dekker, 1989. – 315 p.
3. *Александров А. Ю., Жабко А. П.* Устойчивость разностных систем. – Санкт-Петербург: СПб гос. ун-т, 2003. – 111 с.
4. *Martynyuk A. A.* Stability of motion. The role of multicomponent Liapunov's functions. – Cambridge: Cambridge Scientific Publishers, 2007. – 322 p.

*Институт механики им. С. П. Тимошенко  
НАН Украины, Киев*

*Поступило в редакцию 10.09.2013*

Академік НАН України **А. А. Мартинюк**

### **Про стійкість траєкторій множини різницевих рівнянь**

*Для множини різницевих рівнянь, які генеруються дискретизацією множини диференціальних рівнянь із похідною Хукухари, встановлено принцип порівняння з матричною функцією Ляпунова, а також достатні умови стійкості множини траєкторій. Аналіз проведено на основі матричної функції Ляпунова спеціальної структури.*

Academician of the NAS of Ukrain **A. A. Martynyuk**

### **On the stability of trajectories of a set of difference equations**

*For a set of difference equations generated by the discretization of a set of differential equations with a Hukuhara derivative, the comparison principle with a Lyapunov matrix function and the sufficient conditions for the stability of a set of trajectories are established. The analysis is carried out on the basis of the Lyapunov matrix function with a special structure.*



УДК 621.315.592.3

П. І. Баранський, Г. П. Гайдар

## Вплив високотемпературного відпалу на параметри анізотропії рухливості і анізотропії термо-ЕРС захоплення електронів фононами в $n$ -Si

(Представлено членом-кореспондентом НАН України Є. Ф. Венгером)

У дослідях з кристалами  $n$ -Si, легованими домішкою фосфору через розплав і шляхом ядерної трансмутації, досліджено вплив високотемпературного відпалу (при  $T = 1200$  °C протягом 2 год) на параметр анізотропії рухливості  $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$  і параметр анізотропії термо-ЕРС захоплення електронів фононами  $M = \alpha_{\parallel}^{\Phi}/\alpha_{\perp}^{\Phi}$ . Показано, що в кристалах кремнію, легованих через розплав, термовідпал приводить до помітного зниження величини  $M$ , тоді як у трансмутаційно легованих зразках значення цього параметра збільшується в  $\sim 1,5$  рази. Встановлено, що параметр анізотропії рухливості  $K$  в кристалах обох типів залишається практично незмінним. Запропоновано пояснення одержаних результатів.

Високотемпературний відпал (ВТВ) напівпровідникових кристалів при  $T = 1200$  °C протягом 2 год може приводити до дифузійних процесів атомів легуючих і залишкових домішок, а також міжвузлових атомів і вакансій в об'ємі кристалів. Саме тому за об'єкти дослідження обрано кристали  $n$ -Si, близькі за рівнем концентрації легуючої і залишкових домішок з тією різницею, що в кристали, умовно віднесені до 1-го типу, легуюча домішка (фосфор) вводилася в їх об'єм через розплав ( $\text{Si}^{3\text{B}}$ ), а в кристали 2-го типу легуючий фосфор вводився за рахунок ядерної трансмутації ( $\text{Si}^{\text{T.II}}$ ), тобто шляхом опромінення високочистих кристалів  $n$ -Si потоком повільних (теплових) нейтронів. Це приводило в об'ємі опромінюваних кристалів до перетворення атомів Si у вузлах кристалічної ґратки в атоми фосфору у відповідності з ядерною реакцією



та з урахуванням ізотопного складу кристалів кремнію в такому співвідношенні:  $^{30}\text{Si}$  (3,12%);  $^{28}\text{Si}$  (92,18%) і  $^{29}\text{Si}$  (4,70%) [1, 2].

© П. І. Баранський, Г. П. Гайдар, 2014

Як джерела теплових нейтронів (з енергією  $E_n \leq 100$  кеВ) використовуються дослідницькі атомні реактори або атомні реактори АЕС, які завжди характеризуються наявністю потоків теплових нейтронів високої густини. Опромінення кремнію тепловими нейтронами супроводжується також опроміненням швидкими нейтронами і  $\gamma$ -компонентою реакторного спектра. В результаті отримують монокристали кремнію, насичені всіма відомими на даний час радіаційними дефектами, чому сприяють надзвичайно інтенсивні інтегральні потоки нейтронів ( $\sim 10^{18} \div 10^{19}$  н/см<sup>2</sup>) в каналах ядерних реакторів. Тому, незалежно від вихідного типу матеріалу і його параметрів, трансмутаційно легований (ТЛ) кремній безпосередньо після опромінення характеризується провідністю  $p$ -типу з питомим опором  $\rho \approx 10^5 \div 10^6$  Ом · см і дуже малим часом життя неосновних носіїв заряду. Крім того, після опромінення кремнію нейтронами ядерного реактора атоми  $^{31}\text{Si}$  (які спонтанно переходять у  $^{31}\text{P}$ ) виявляються, як правило, у міжвузловому положенні, яке, як відомо, відповідає електрично-неактивному стану. Таким чином, для відпалу радіаційних дефектів і для активації атомів  $^{31}\text{P}$ , які в об'ємі кремнію проявляють донорні властивості лише у вузлах ґратки, ТЛ кремній необхідно піддавати термообробці.

Механізми виникнення радіаційних дефектів і специфіка їх термовідпалу, а також причини, що забезпечують їх термостійкість в опроміненних кристалах, детально обговорювалися в спеціалізованій літературі [3–7] і в ряді книг довідкового характеру [8, 9].

Вважають, що ті дефекти, які виникають у трансмутаційно легованих кристалах Si при їх опроміненні тепловими нейтронами, можуть бути майже повністю усунені з об'єму кристала шляхом відпалу при  $T = 800 \div 850$  °С протягом 1–2 год (так званий технологічний термовідпал).

Трансмутаційно леговані кристали Si за рахунок опромінення тепловими нейтронами відрізняються від звичайних (ЗВ) кристалів Si, легованих домішкою фосфору через розплав, не тільки підвищеною однорідністю в розподілі легуючої домішки по об'єму кристала [10–12], але також і більш високими значеннями рухливості  $\mu$  за інших рівних умов.

Виникало питання, чи знаходять свій прояв у ТЛ кристалах Si подібні переваги (порівняно із ЗВ кристалами) і тоді, коли як пробні будуть використані явища, пов'язані з розсіянням фононів, а не електронів. Такий підхід (у разі його дієвості) буде еквівалентним, в принципі, розширенню можливостей методики, оскільки де-бройлівська довжина хвиль фононів  $\lambda_f$  задовольняє нерівність  $\lambda_f < \lambda_e$ .

Дійсно, коли мова йде про розсіяння певних квазічастинок, наприклад, електронів або фононів, то оцінювати перешкоди для їх руху в кристалі зручно шляхом порівняння розмірів цих перешкод з довжиною хвиль де Бройля, що характеризують відповідні об'єкти. У зв'язку з цим потрібно зазначити, що технологічний термовідпал, який проходять трансмутаційно леговані кристали  $n\text{-Si}\langle P \rangle$ , усуває з об'єму кристала радіаційні дефекти, порівнянні за своїми розмірами з електронною хвилею де Бройля, і рухливість носіїв струму в таких відпалених кристалах істотно зростає. Але це зовсім не означає, що при такому (технологічному) відпалі усуваються абсолютно всі радіаційні дефекти: набагато менші за розміром дефекти можуть залишатися, а електронна хвиля де Бройля при своєму поширенні в кристалі їх буде просто “не помічати”, легко огинаючи. Для виявлення менших за розмірами дефектів необхідно скористатися набагато коротшими хвилями. Якщо електронна хвиля де Бройля в кристалі перекриває сотню або декілька сотень міжатомних відстаней, то фонони, які відповідальні за формування термо-ЕРС захоплення електронів фононами (в інтервалі температур  $T \approx 20 \div 80$  К у випадку Si і Ge), мають довжину хвилі на 1,5–2 порядки меншу за електронну хвилю де Бройля.

Дані робіт [13–15] свідчать про те, що при заданій поляризації довгохвильових фононів ( $l$  або  $t$ ) захоплення електронів фононами в напрямку довгої (головної) осі ізоенергетичного еліпсоїда є визначальним, тобто  $\alpha_{\parallel}^{(l,t)} \gg \alpha_{\perp}^{(l,t)}$ , а при заданому напрямку по відношенню до осей еліпсоїда переважаюча роль у захопленні електронів фононами належить фононам поздовжньої поляризації, тобто  $\alpha_{\parallel,\perp}^{(l)} \gg \alpha_{\parallel,\perp}^{(t)}$ . Внаслідок цього зіставлення термоелектричних властивостей різних зразків (легованих, наприклад, різними способами) потрібно проводити саме за компонентою  $\alpha_{\parallel}^{(l)}$ , і тому, відповідно до результатів, одержаних у [13],  $\alpha_{\parallel}^{(l)\text{ЗВ}}/\alpha_{\parallel}^{(l)\text{ТЛ}} \approx 1,7$ . Звідси випливає, що поздовжні фонони (якими переважно визначається фононна складова термо-ЕРС захоплення електронів фононами вздовж довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда  $\alpha_{\parallel}^{\Phi} \sim \alpha_{\parallel}^{(l)}$ ) ефективніше розсіюються в ТЛ (що пройшли лише технологічний відпал) кристалах, ніж у ЗВ кристалах кремнію, легованих домішкою фосфору у тій же концентрації через розплав.

Метою даної роботи було вивчення впливу високотемпературного відпалу (при  $T = 1200$  °С протягом 2 год) та різних швидкостей охолодження ( $v_{\text{охол}}$ ) на параметри анізотропії рухливості  $K$  і анізотропії термо-ЕРС захоплення електронів фононами  $M$  у кристалах  $n$ -Si двох типів: звичайних (легованих домішкою фосфору через розплав) і трансмутаційно легованих (легованих фосфором шляхом ядерної трансмутації).

Експериментальні дослідження проводилися на зразках кремнію, які мали необхідну кристалографічну орієнтацію (довжина їх збігалася з напрямком [100]), що дозволяло проводити виміри (при 77 К) змін питомого опору  $\rho$  з тиском  $X$ , виводячи функцію  $\rho(X)$  на насичення ( $\lim_{X \rightarrow \infty} \rho(X) = \rho_{\infty}$ ), яке досягалося за умов  $T = 77$  К і  $X \geq (0,6 \div 1,0)$  ГПа і забезпечувало отримання параметра анізотропії рухливості електронів у рамках окремо взятого ізоенергетичного еліпсоїда за формулою

$$K = \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} = \frac{3}{2} \frac{\rho_{\infty}}{\rho_0} - \frac{1}{2}, \quad (2)$$

де  $\rho_0$  — питомий опір при  $X = 0$ ;  $\mu_{\parallel}$ ,  $\mu_{\perp}$  — рухливості носіїв заряду вздовж і поперек довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда відповідно.

Значення параметра анізотропії термо-ЕРС захоплення електронів фононами визначали за формулою

$$M = \frac{\alpha_{\parallel}^{\Phi}}{\alpha_{\perp}^{\Phi}} = \frac{2K}{(2K + 1) \frac{\alpha_0^{\Phi}}{\alpha_{\infty}^{\Phi}} - 1}, \quad (3)$$

$$\alpha_0^{\Phi} = \alpha_0 - \alpha^e, \quad (4)$$

$$\alpha_{\infty}^{\Phi} = \alpha_{\infty} - \alpha^e, \quad (5)$$

де  $\alpha_0^{\Phi}$ ,  $\alpha_{\infty}^{\Phi}$  — фононні складові термо-ЕРС без тиску ( $X = 0$ ) і в насиченні ( $X \rightarrow \infty$ ), які дорівнюють дослідним даним ( $\alpha_0$  і  $\alpha_{\infty}$ ) без електронної (дифузійної) складової  $\alpha^e = \frac{k}{e} \left[ 2 + \ln \frac{2(2\pi m^* kT)^{3/2}}{n_0 h^3} \right]$  (формула Писаренка);  $n_0$  — концентрація носіїв заряду;  $e$  — заряд електрона;  $k$  — постійна Больцмана;  $T$  — температура;  $h$  — стала Планка;  $m^* = N^{2/3} \sqrt[3]{m_{\parallel} m_{\perp}^2}$  — ефективна маса густини станів;  $N$  — число ізоенергетичних еліпсоїдів,



зокрема для  $n$ -Si  $N = \begin{cases} 6 & \text{при } X = 0, \\ 2 & \text{при } X \geq 0,6 \text{ ГПа;} \end{cases}$   $m_{\parallel}, m_{\perp}$  — ефективні маси вздовж і поперек довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда відповідно.

На двох групах (по три зразки в кожній) звичайних і двох групах трансмутаційно легованих зразків  $n$ -Si шляхом вимірів величин, що знаходяться в правій частині виразів (2) і (3), були отримані значення  $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$  і  $M = \alpha_{\parallel}^{\Phi}/\alpha_{\perp}^{\Phi}$  як у вихідному стані, так і після високотемпературного відпалу при 1200 °С протягом 2 год (і при двох швидкостях охолодження від температури ВТВ до кімнатної). Результати цих дослідів наведені в табл. 1.

Аналіз одержаних даних (див. табл. 1) показує, що:

як у досліді з звичайними, так і з трансмутаційно легованими зразками, значення параметра  $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$  в межах точності вимірів при використаних термовідпалах практично не зазнають помітних змін, проявляючи лише деяку тенденцію до зниження;

на відміну від  $K$ , значення параметра  $M = \alpha_{\parallel}^{\Phi}/\alpha_{\perp}^{\Phi}$  при тих же термовідпалах зазнають помітних змін: якщо у звичайних кристалах значення  $M$  (після термовідпалу при 1200 °С протягом 2 год і незалежно від швидкості їх охолодження) виявилися за своєю величиною лише спадними, то у випадку трансмутаційно легованих кристалів ці зміни параметра  $M$  в результаті термовідпалу зростали приблизно у 1,49 раза, хоча рухливість носіїв заряду  $\mu_{77K}^{ТЛ}$  при цьому тільки знижувалася.

Характерно, що тенденції до зниження  $K$  і  $\mu_{77K}^{ТЛ}$  після термовідпалів (і охолоджень) були практично малопомітними порівняно зі змінами параметра  $M$ , які в досліді з звичайними і трансмутаційно легованими кристалами були якісно протилежними за знаком.

Знайдені відмінності в зміні  $M$  для двох типів зразків (ЗВ і ТЛ) можна пояснити наявністю в трансмутаційно легованих кристалах залишкових дефектів радіаційного походження, які, фактично, технологічний відпал повністю усунути не спроможний. У кристалах, легованих через розплав, подібні дефекти в принципі відсутні.

Підсумовуючи все вищезазначене, можна зробити такі висновки.

1. Досліджено зв'язок параметрів  $M$  з  $K$  для температури 77 К з використанням аналітичного виразу, який пов'язує між собою параметр анізотропії термо-ЕРС захоплення електронів фононами в окремо взятому ізоенергетичному еліпсоїді  $M = \alpha_{\parallel}^{\Phi}/\alpha_{\perp}^{\Phi}$  з пара-

Таблиця 1. Вплив високотемпературних відпалів і різних швидкостей охолодження на значення параметрів  $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$  і  $M = \alpha_{\parallel}^{\Phi}/\alpha_{\perp}^{\Phi}$  у кристалах  $n$ -Si, легованих через розплав і шляхом ядерної трансмутації

Зразки $n$ -Si	$n_e, \text{см}^{-3}$	$\mu_{77K}, \text{см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$	$K = \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}}$	$M = \frac{\alpha_{\parallel}^{\Phi}}{\alpha_{\perp}^{\Phi}}$	Тип легування
Вихідний Si <sup>ЗВ</sup>	$1,90 \cdot 10^{13}$	$1,98 \cdot 10^4$	5,40	6,62	через розплав
ВТВ 1200 °С, 2 год $v_{\text{охол}} 1000 \text{ °С/хв}$	$1,98 \cdot 10^{13}$	$2,03 \cdot 10^4$	5,40	6,41	
$v_{\text{охол}} 1 \text{ °С/хв}$	$2,06 \cdot 10^{13}$	$2,00 \cdot 10^4$	5,30	5,62	
Вихідний Si <sup>ЗВ</sup>	$5,50 \cdot 10^{13}$	$1,96 \cdot 10^4$	5,23	6,30	транс-мутаційне
ВТВ 1200 °С, 2 год $v_{\text{охол}} 1000 \text{ °С/хв}$	$5,65 \cdot 10^{13}$	$2,01 \cdot 10^4$	5,20	5,70	
$v_{\text{охол}} 1 \text{ °С/хв}$	$5,10 \cdot 10^{13}$	$1,99 \cdot 10^4$	5,23	5,20	
Вихідний Si <sup>ТЛ</sup>	$5,73 \cdot 10^{13}$	$2,14 \cdot 10^4$	5,25	5,40	транс-мутаційне
ВТВ 1200 °С, 2 год $v_{\text{охол}} 1000 \text{ °С/хв}$	$5,93 \cdot 10^{13}$	$2,05 \cdot 10^4$	5,56	7,50	
$v_{\text{охол}} 1 \text{ °С/хв}$	$5,10 \cdot 10^{13}$	$2,00 \cdot 10^4$	5,50	7,20	
Вихідний Si <sup>ТЛ</sup>	$5,72 \cdot 10^{13}$	$2,14 \cdot 10^4$	5,23	5,40	транс-мутаційне
ВТВ 1200 °С, 2 год $v_{\text{охол}} 1000 \text{ °С/хв}$	$5,92 \cdot 10^{13}$	$2,06 \cdot 10^4$	5,56	7,60	
$v_{\text{охол}} 1 \text{ °С/хв}$	$5,10 \cdot 10^{13}$	$2,00 \cdot 10^4$	5,50	7,20	

метром анізотропії рухливості  $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$  і відношенням фононної складової термо-ЕРС захоплення електронів фононами в недеформованому (шестидолинному) і сильно деформованому (дводолинному) кристалах  $n$ -Si. Експерименти проведено на двох типах зразків кремнію: легованих домішкою фосфору через розплав (звичайні кристали) і легованих цією ж домішкою за рахунок ядерної трансмутації (трансмутаційно леговані кристали).

2. З'ясовано, що параметр анізотропії рухливості  $K$  при високотемпературних відпалах ( $T = 1200$  °C,  $t = 2$  год) і подальшому охолодженні з різними швидкостями ( $v_{\text{охол}} = 1000$  і  $1$  °C/хв) в кристалах обох типів (ЗВ і ТЛ) залишається практично незмінним.

3. Встановлено, що параметр анізотропії термо-ЕРС захоплення електронів фононами  $M = \alpha_{\parallel}^{\Phi}/\alpha_{\perp}^{\Phi}$  помітно змінюється при високотемпературному відпалі й охолодженні, причому виявлені зміни  $M$  якісно різні для двох типів кристалів  $n$ -Si: у легованих через розплав кристалах значення параметра  $M$  зменшуються, тоді як у трансмутаційно легованих зразках зростають приблизно у півтора раза. Фактично шляхом високотемпературної обробки трансмутаційно легованого  $n$ -Si розсіюючі центри для довгохвильових фононів усуваються, внаслідок чого ймовірність розсіяння фононів зменшується й анізотропія термо-ЕРС різко зростає.

1. *Tanenbaum M., Mills A. D.* Preparation of uniform resistivity  $n$ -type silicon by nuclear transmutation // J. Electrochemical Soc. – 1961. – **108**, No 2. – P. 171–176.
2. *Баранский П. И., Бугай А. А., Гирый В. А. и др.* Трансмутационное легирование кремния: получение, физические свойства, применение. – Киев: Ин-т физики АН УССР, 1984. – 60 с. – (Препринт / АН УССР, Ин-т физики; № 28).
3. *Вавилов В. С., Ухин Н. А.* Радиационные эффекты в полупроводниках и полупроводниковых приборах. – Москва: Атомиздат, 1969. – 312 с.
4. *Козозенко И. Д., Семенюк А. К., Хиврич В. И.* Радиационные эффекты в кремнии. – Киев: Наук. думка, 1974. – 199 с.
5. *Смирнов Л. С., Соловьев С. П., Стась В. Ф., Харченко В. А.* Легирование полупроводников методом ядерных реакций / Под ред. Л. С. Смирнова. – Новосибирск: Наука, 1981. – 181 с.
6. *Вавилов В. С., Кекелидзе Н. П., Смирнов Л. С.* Действие излучений на полупроводники. – Москва: Наука, 1988. – 192 с.
7. *Гроза А. А., Литовченко П. Г., Старчик М. И.* Эффекты радиации в инфракрасном поглинании та структурі кремнію. – Київ: Наук. думка, 2006. – 124 с.
8. *Баранский П. И., Клочков В. П., Потыкевич И. В.* Полупроводниковая электроника. Справочник. – Киев: Наук. думка, 1975. – 704 с.
9. *Физика твердого тела.* Энциклопедический словарь. Т. II. / Под ред. В. Г. Барьяхтара. – Киев: Наук. думка, 1998. – 645 с.
10. *Herrmann H. A., Herzer H.* Doping of silicon by neutron irradiation // J. Electrochem. Soc. – 1975. – **122**, No 11. – P. 1568–1569.
11. *Миз Дж.* Процессы нейтронного трансмутационного легирования – новая реакторная технология // Нейтронное трансмутационное легирование полупроводников. Новости физики твердого тела. Вып. 11 / Под ред. Дж. Миза. (Пер. с англ. под ред. В. Н. Мордковича). – Москва: Мир, 1982. – 264 с.
12. *Смит Т.* Нейтронное легирование на исследовательских реакторах в Харруэлле // Там же. – Москва: Мир, 1982. – 264 с.
13. *Баранский П. И., Савяк В. В., Щербина Л. А.* Исследование фонон-фононной релаксации в нейтронно-легированных и обычных кристаллах кремния // Физика и техника полупроводников. – 1980. – **14**, № 2. – С. 302–305.
14. *Баранский П. И., Буда И. С., Коломоец В. В. и др.* Фонон-фононная релаксация при эффектах увлечения в  $n$ -Ge // Там же. – 1975. – **9**, № 9. – С. 1680–1684.

15. Баранский П. И., Савяк В. В., Щербина Л. А. Исследование фундаментальных параметров, определяющих фонон-фононную релаксацию в  $n$ -Si // Там же. – 1980. – 14, № 2. – С. 393–396.

Институт фізики напівпровідників  
ім. В. Є. Лашкарьова НАН України, Київ  
Институт ядерних досліджень НАН України, Київ

Надійшло до редакції 15.01.2014

**П. И. Баранский, Г. П. Гайдар**

### **Влияние высокотемпературного отжига на параметры анизотропии подвижности и анизотропии термо-ЭДС увлечения электронов фононами в $n$ -Si**

*В опытах с кристаллами  $n$ -Si, легированными примесью фосфора через расплав и путем ядерной трансмутации, исследовано влияние высокотемпературного отжига (при  $T = 1200$  °C в течение 2 ч) на параметр анизотропии подвижности  $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$  и параметр анизотропии термо-ЭДС увлечения электронов фононами  $M = \alpha_{\parallel}^{\phi}/\alpha_{\perp}^{\phi}$ . Показано, что в кристаллах кремния, легированных через расплав, термоотжиг приводит к заметному снижению величины  $M$ , тогда как в трансмутационно легированных образцах значение этого параметра увеличивается в  $\sim 1,5$  раза. Установлено, что параметр анизотропии подвижности  $K$  в кристаллах обоих типов остается практически неизменным. Предложено объяснение полученных результатов.*

**P. I. Baranskii, G. P. Gaidar**

### **Influence of the high-temperature annealing on the anisotropy parameters of mobility and the anisotropy of the thermoelectromotive-drag of electrons by phonons in $n$ -Si**

*In the experiments with crystals of  $n$ -Si doped with impurities of phosphorus through the melt and by the nuclear transmutation, the influence of the high-temperature annealing (at  $T = 1200$  °C during 2 h) on the anisotropy parameter of mobility  $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$  and on the anisotropy parameter of the thermoelectromotive-drag of electrons by phonons  $M = \alpha_{\parallel}^{ph}/\alpha_{\perp}^{ph}$  is investigated. It is shown that, in silicon crystals doped through the melt, the thermoannealing leads to a marked reduction in the value of  $M$ , whereas the value of this parameter increases by about 1.5 times in transmutation-doped samples. It is found that the anisotropy parameter of mobility  $K$  in the crystals of both types remains almost unchanged. The explanation of the results obtained is proposed.*

Академік НАН України Л. А. Булавін, Д. А. Гаврюшенко,  
О. В. Коробко, В. М. Сисоєв, К. В. Черевко

## Дифузійні потоки та продукування ентропії в плоскопаралельній порі у випадку ідеального розчину

*Отримано вирази для визначення потоку речовини, що дифундує, та продукування ентропії в плоскопаралельному шарі з осмотичними граничними умовами за наявності процесів дифузії для бінарного ідеального розчину в рамках лінійної термодинаміки незворотних процесів. Показано, що послідовне врахування залежності коефіцієнта дифузії від польових змінних призводить до істотної відмінності залежності потоку речовини та продукування ентропії в системі від значень, отриманих в рамках загальноновживаного підходу зі сталим коефіцієнтом дифузії. Якісно описано існуючі експериментальні дані з полегшеної дифузії в біологічних системах в рамках загальної теорії дифузії з урахуванням виключно ентропійних ефектів без введення штучних поправок.*

Отримання концентраційної залежності продукування ентропії в обмежених системах є однією з першочергових задач термодинаміки незворотних процесів як польової теорії [1]. Актуальність поставленої задачі пояснюється, зокрема, необхідністю вміти знаходити виробництво ентропії в таких обмежених системах як біологічні мембрани, в яких можуть відбуватися хімічні реакції та проходити процеси дифузії (так зване явище полегшеної дифузії), мезооб'єкти, нанооб'єкти тощо.

Метою запропонованої роботи є визначення концентраційної залежності функції густини продукування ентропії для моделі ідеального розчину, тобто розчину, в якому внесок в зміну термодинамічних потенціалів при змішуванні обумовлений виключно ентропійними ефектами [2].

В роботі [3] отримано загальні вирази, що дозволяють обчислити потоки речовин, що дифундують при наявності в системі хімічних реакцій, градієнтів температури, хімічного потенціалу та відсутності зовнішніх полів, також розглянуто продукування ентропії у відповідній нерівноважній системі.

Для бінарного розчину у випадку, коли всередині плоскопаралельної мембрани знаходяться лише субстрат, що дифундує крізь мембрану, та носій, який спричиняє процес так званої полегшеної дифузії (в цьому випадку потік носія  $J_2 = 0$ ), в стаціонарному випадку було отримано систему рівнянь, що дозволяє обчислити потік субстрату:

$$\left\{ \begin{array}{l} J_1 = -2kL_1 \frac{dx_1}{dz} \left\{ \left[ \frac{1}{x_1} + \frac{\partial}{\partial x_1} \ln \gamma_1 \right] + \frac{v_{10} + kT \frac{\partial}{\partial p} \ln \gamma_1}{v_{20} + kT \frac{\partial}{\partial p} \ln \gamma_2} \left[ \frac{1}{1-x_1} - \frac{\partial}{\partial x_1} \ln \gamma_2 \right] \right\}, \\ \frac{dx_2}{dz} = -\frac{dx_1}{dz}, \\ \frac{dp}{dz} = -\frac{2kT \left[ \frac{\partial}{\partial x_1} \ln \gamma_2 - \frac{1}{1-x_1} \right]}{v_{20} + kT \frac{\partial}{\partial p} \ln \gamma_2} \frac{dx_1}{dz} \end{array} \right. \quad (1)$$

з граничними умовами

$$\begin{cases} x_1(z=0) = x_0, \\ x_1(x=l) = x_l. \end{cases} \quad (2)$$

Продуктування ентропії в цьому процесі визначається виразом:

$$\sigma = L_1(2k)^2 \left( \frac{dx_1}{dz} \right)^2 \times \left\{ \left[ \frac{1}{x_1} + \frac{\partial}{\partial x_1} \ln \gamma_1 \right] - \frac{v_{10} + kT \frac{\partial}{\partial p} \ln \gamma_1}{v_{20} + kT \frac{\partial}{\partial p}} \ln \gamma_2 \left[ \frac{\partial}{\partial x_1} \ln \gamma_2 - \frac{1}{1-x_1} \right] \right\}^2. \quad (3)$$

Потік речовини та продуктування ентропії за допомогою отриманих виразів (1) та (3) можна обчислити шляхом конкретизації залежності хімічного потенціалу компоненти розчину від тиску, температури та концентрації.

Розглянемо випадок, коли розчин є ідеальним, тобто коефіцієнт активності тотожно дорівнює одиниці ( $\mu_1(T, p, x_1) = \mu_{10}(T, p) + kT \ln x_1$ ). В рамках цієї моделі вважається, що при змішуванні внесок ентропійних факторів у термодинамічні потенціали значно переважає над енергетичними, якими можна знехтувати. Тоді систему рівнянь (1) можна записати у вигляді:

$$\begin{cases} J_1 = -2kL_1 \frac{dx_1}{dz} \left\{ \frac{1}{x_1} + \frac{v_{10}}{v_{20}} \frac{1}{1-x_1} \right\}, \\ \frac{dx_2}{dz} = -\frac{dx_1}{dz}, \\ \frac{dp}{dz} = \frac{2kT}{v_{20}} \frac{1}{1-x_1} \frac{dx_1}{dz}. \end{cases} \quad (4)$$

Система рівнянь (4) з граничними умовами (2) повністю описує процес дифузії в мембранній системі у випадку бінарного розчину, що задається моделлю ідеального розчину.

Проінтегруємо рівняння (4) з граничними умовами (2) і отримаємо вираз для стаціонарного потоку  $J_1$ :

$$J_1 = -\frac{2kL_1}{l} \left( \ln \frac{x_l}{x_0} - \frac{v_{10}}{v_{20}} \ln \frac{1-x_l}{1-x_0} \right). \quad (5)$$

Це дозволяє записати вираз, який в неявному вигляді визначає просторову залежність концентрації  $x_1(z)$ :

$$\frac{1}{z} \left( \ln \frac{x_1(z)}{x_0} - \frac{v_{10}}{v_{20}} \ln \frac{1-x_1(z)}{1-x_0} \right) = \frac{1}{l} \left( \ln \frac{x_l}{x_0} - \frac{v_{10}}{v_{20}} \ln \frac{1-x_l}{1-x_0} \right). \quad (6)$$

Друге та третє рівняння системи рівнянь (4) разом з отриманим виразом (6) дозволяють знайти просторовий розподіл концентрації другого компонента бінарного розчину та тиску в системі.

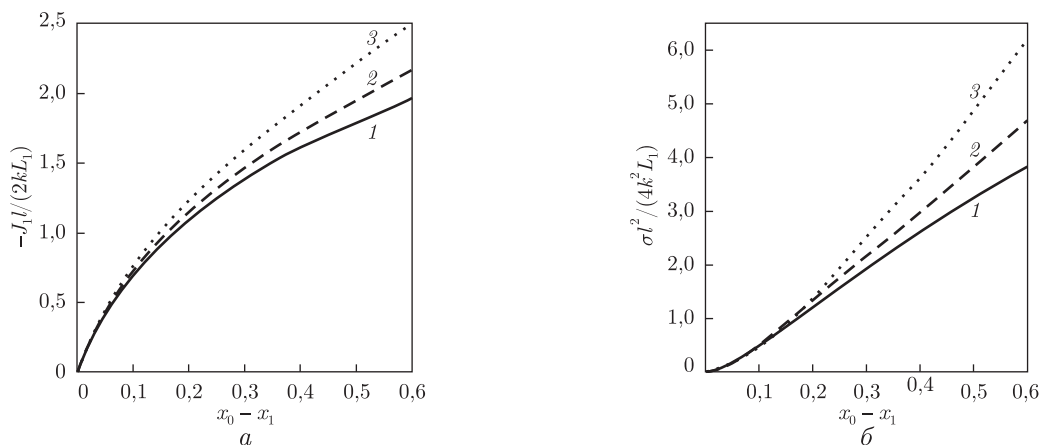


Рис. 1. Залежність нормованого потоку  $-\frac{l}{2kL_1}J_1$  (а) та нормованого продукування ентропії  $\frac{l^2}{(2k)^2L_1}\sigma$  (б) від величини  $x_0 - x_l$  при різних значеннях відношення  $\frac{v_{10}}{v_{20}}$  в рамках моделі ідеального розчину: 1 —  $\frac{v_{10}}{v_{20}} = 0,01$ ; 2 —  $\frac{v_{10}}{v_{20}} = 0,2$ ; 3 —  $\frac{v_{10}}{v_{20}} = 0,5$ . На правій границі мембрани задано  $x_l = 10^{-1}$

На рис. 1, а та 2, а наведено залежності нормованого потоку речовини, що дифундує крізь мембрану, від різниці концентрацій на границях системи  $x_0 - x_l$  при різних значеннях співвідношення парціальних об'ємів компонентів розчину та при двох різних значеннях  $x_l$ .

Наведені результати свідчать про значну нелінійність залежності потоку від величини  $x_0 - x_l$ . Нагадаємо, що ці результати було отримано у випадку ідеального розчину, тобто з урахуванням лише ентропійного внеску в зміну термодинамічного потенціалу при змішуванні. Підкреслимо, що одержане відхилення від лінійності зумовлене врахуванням залежності коефіцієнта дифузії від польових змінних.

Аналіз наших результатів вказує на те, що при малих значеннях величини  $x_0 - x_l$  ( $x_0 - x_l < 0,1$  — для даних, наведених на рис. 1, а, та  $x_0 - x_l < 0,01$  — для даних, наведених на рис. 2, а) спостерігається практично лінійна залежність потоку, але зі зростанням  $x_0 - x_l$  залежність  $J_1(x_0 - x_l)$  істотно відхиляється від лінійної. При цьому має місце стабілізуючий ефект — потік починає слабко залежати від різниці концентрації на границях системи. Ці дані свідчать про те, що при зменшенні величини відношення парціального мольного об'єму речовини, що дифундує через мембрану, до аналогічної величини розчинника спостерігається значне посилення стабілізуючого ефекту за умови збільшення різниці концентрацій на границях мембрани.

У випадку полегшеної дифузії біологічно активної речовини через біомембрани (наприклад, кисню за допомогою гемоглобіну) відношення  $v_{10}/v_{20}$  є надзвичайно малим. Крім того, концентрація речовини, що переноситься, на правій границі системи в більшості випадків підтримується досить малою. Таким чином, біологічному транспорту відповідає перша крива на рис. 2, а. В цьому випадку у фізіологічному інтервалі зміни різниці  $x_0 - x_l$  потік залишається практично сталим, що відповідає особливостям полегшеної дифузії в біологічних системах.

На рис. 3, а наведено залежність нормованого дифузійного потоку від величини  $x_0 - x_l$  при  $v_{10}/v_{20} = 0,01$  та нормованого дифузійного потоку у випадку сталого коефіцієнта дифузії. Як бачимо, при малих значеннях  $x_0 - x_l$  спостерігається значне збільшення дифузійного потоку полегшеної дифузії: при  $x_0 - x_l = 10^{-2}$  відношення потоків досягає  $\approx 110$ , при

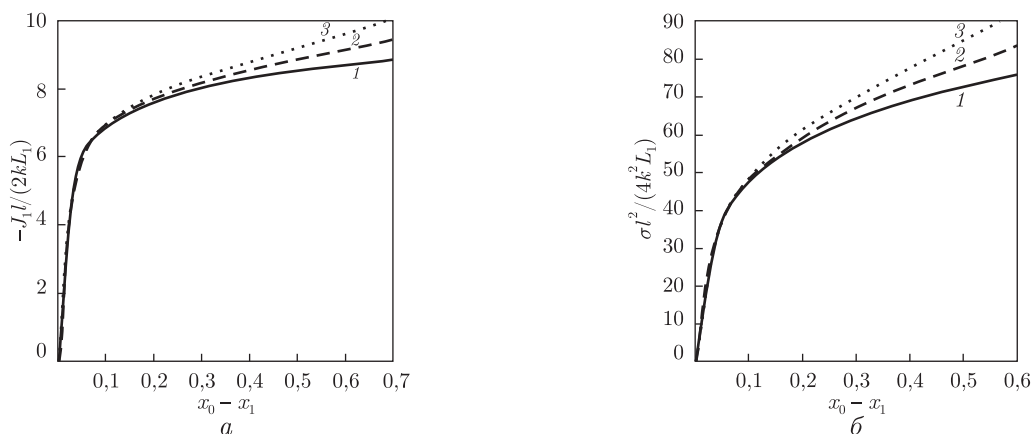


Рис. 2. Залежність нормованого потоку  $-\frac{l}{2kL_1}J_1$  (а) та нормованого продукування ентропії  $\frac{l^2}{(2k)^2L_1}\sigma$  (б) від величини  $x_0 - x_l$  при різних значеннях відношення  $\frac{v_{10}}{v_{20}}$  в рамках моделі ідеального розчину: а — 1 —  $\frac{v_{10}}{v_{20}} = 0,01$ ; 2 —  $\frac{v_{10}}{v_{20}} = 0,5$ ; 3 —  $\frac{v_{10}}{v_{20}} = 1,0$ ; б — 1 —  $\frac{v_{10}}{v_{20}} = 0,01$ ; 2 —  $\frac{v_{10}}{v_{20}} = 0,2$ ; 3 —  $\frac{v_{10}}{v_{20}} = 0,5$ . На правій границі мембрани задано  $x_l = 10^{-4}$

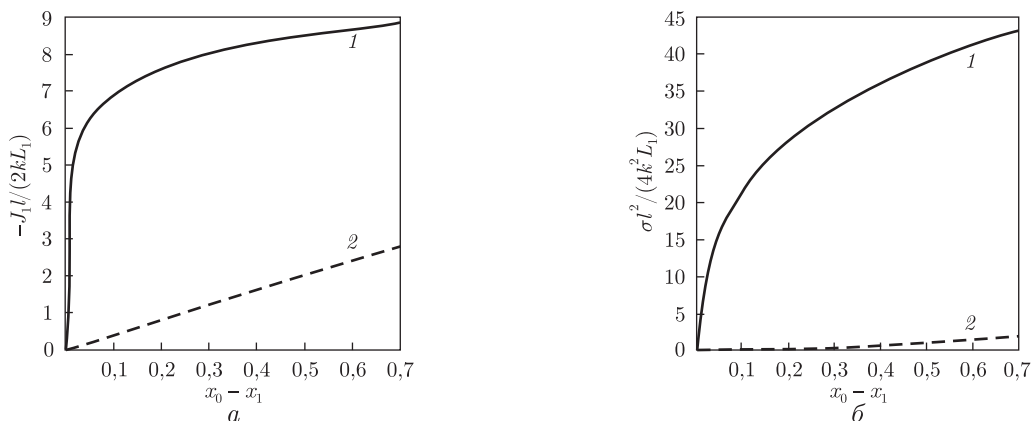


Рис. 3. Залежність нормованого дифузійного потоку (а) та нормованого продукування ентропії  $\frac{l^2}{(2k)^2L_1}\sigma$  (б) від величини  $x_0 - x_l$  при  $\frac{v_{10}}{v_{20}} = 0,01$  в рамках моделі ідеального розчину (1) та при умові  $D = \text{const}$  (2). На правій границі мембрани задано  $x_l = 10^{-4}$

$x_0 - x_l = 10^{-1} \approx 15$ . При подальшому збільшенні величини  $x_0 - x_l$  добре проявляється стабілізуючий ефект: при зміні  $x_0 - x_l$  від 0,2 до 0,7 полегшений потік зростає на  $\approx 17\%$ , а потік із сталим коефіцієнтом дифузії, як і слід було чекати, на  $\approx 250\%$ .

Отриманий вираз (5) для дифузійного потоку дозволяє за допомогою формули (3) знайти вираз для основної характеристики нерівноважного стаціонарного процесу — продукування ентропії — в даному випадку:

$$\sigma = \frac{(2k)^2 L_1}{l^2} \left( \ln \frac{x_l}{x_0} - \frac{v_{10}}{v_{20}} \ln \frac{1-x_l}{1-x_0} \right)^2. \quad (7)$$

На рис. 1, б та 2, б наведено концентраційну залежність продукування ентропії від різниці концентрацій на границях системи  $x_0 - x_l$  при різних значеннях співвідношень парціаль-

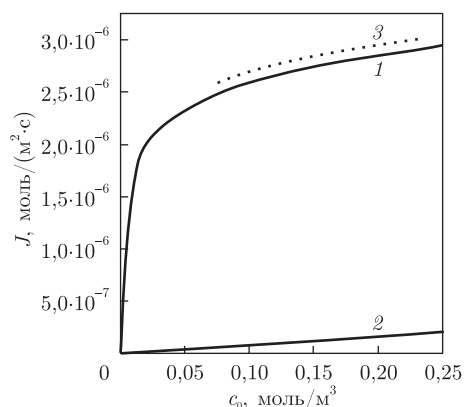


Рис. 4. Потік кисню у водному розчині гемоглобіну як функція концентрації кисню на лівій границі мембрани: 1 — полегшена дифузія за розрахунками Маррі [4]; 2 — дифузійний потік; 3 — експериментальні результати Уіттенберга [5]

них об'ємів компонентів розчину та для двох різних значень  $x_l$ . Ці результати вказують на значне відхилення від квадратичної залежності продукування ентропії від величини  $x_0 - x_l$ , якої слід було чекати в рамках широковживаного підходу, що базується на припущенні про незалежність коефіцієнта дифузії від польових змінних.

Аналіз результатів вказує на те, що при малих значеннях величини  $x_0 - x_l$  ( $x_0 - x_l < 0,1$  — для даних, наведених на рис. 1, б, та  $x_0 - x_l < 0,01$  — для даних, наведених на рис. 2, б) спостерігається практично квадратична залежність продукування ентропії, проте при зростанні  $x_0 - x_l$  залежність  $\sigma(x_0 - x_l)$  істотно відхиляється від квадратичної, і спостерігається стабілізуючий ефект — ентропія починає слабко залежати від різниці концентрації на границях системи. Отже, при зменшенні величини відношення парціальних мольних об'ємів речовини, що дифундує через мембрану, та розчинника відбувається значне посилення стабілізуючого ефекту при збільшенні різниці концентрацій на границях мембрани.

У випадку полегшеної дифузії біологічно активної речовини через мембрани (наприклад, кисню за допомогою гемоглобіну) відношення  $v_{10}/v_{20}$  є надзвичайно малим, крім того, концентрація речовини, що переноситься, на правій границі системи в більшості випадків підтримується достатньо малою, тому біологічному транспорту відповідає перша крива на рис. 2, б. В цьому випадку в фізіологічному інтервалі зміни різниці  $x_0 - x_l$  продукування ентропії також залишається практично сталим, що відповідає особливостям полегшеної дифузії в біологічних системах [5].

Рис. 3, б ілюструє залежність нормованого продукування ентропії від величини  $x_0 - x_l$  при  $v_{10}/v_{20} = 0,01$  та нормованого продукування ентропії для випадку сталого коефіцієнта дифузії. Як бачимо, при малих значеннях  $x_0 - x_l$  спостерігається значне збільшення продукування ентропії у випадку полегшеної дифузії: при  $x_0 - x_l = 10^{-2}$  відношення величин продукування ентропії досягає  $\approx 1,1 \cdot 10^4$ , при  $x_0 - x_l = 10^{-1}$  —  $\approx 5 \cdot 10^2$ . При подальшому збільшенні величини  $x_0 - x_l$  стабілізуючий ефект посилюється: при зміні  $x_0 - x_l$  від 0,2 до 0,7 продукування ентропії при полегшеній дифузії зростає на  $\approx 50\%$ , а продукування ентропії із сталим коефіцієнтом дифузії, як і слід було чекати, на  $\approx 1100\%$ .

На рис. 4 наведено залежність повного потоку кисню у водному розчині гемоглобіну від концентрації кисню на лівій границі мембрани за умови сталої концентрації на правій границі (тобто, фактично, як функцію градієнта концентрації кисню), отриману теоретично



Маррі [4] та експериментально підтверджену Уїттенбергом [5]. Результати Маррі отримано за допомогою явного врахування протікання в системі зворотних хімічних реакцій шляхом побудови розв'язку асимптотичного розкладу в нульовому наближенні сингулярно збуреного рівняння. Як видно з порівняння отриманих результатів (див. рис. 3, *a*) з наведеними даними (див. рис. 4), запропонований підхід врахування зворотних хімічних реакцій шляхом розгляду фізико-хімічних особливостей розчину, в якому відбувається процес дифузії, дає результати, що якісно та кількісно збігаються з літературними даними, отриманими як експериментальним, так і теоретичним шляхом. Зокрема, при малих значеннях  $c_0$  спостерігається значне збільшення дифузійного потоку полегшеної дифузії, а при збільшенні величини  $c_0$  добре проявляється значний стабілізуючий ефект.

Таким чином, можна зробити такі висновки.

1. Визначення продукування ентропії в процесі полегшеної дифузії з урахуванням зворотних хімічних реакцій шляхом розгляду відповідних коефіцієнтів активностей розчину призводить до появи значного стабілізуючого ефекту за градієнтом концентрації речовини при продукуванні ентропії.

2. Результати, отримані для випадку ідеального розчину, вказують на існування стабілізуючого ефекту для продукування ентропії, обумовленого виключно ентропійними внесками в зміну термодинамічних потенціалів при змішуванні.

1. *de Groot C., Mazur P.* Неравновесная термодинамика. – Москва: Мир, 1964. – 456 с.
2. *Дуров В. А., Агеев Е. П.* Термодинамическая теория растворов. – Москва: Изд. Моск. гос. ун-та, 1987. – 246 с.
3. *Scatchard G., Hamer W. J.* The application of equations for the chemical potentials to partially miscible solutions // *J. Amer. Chem. Soc.* – 1936. – No 353. – P. 1805–1809.
4. *Murray J. D.* On the molecular mechanism of facilitated oxygen diffusion by haemoglobin and myoglobin // *Proc. R. Soc. Lond. B.* – 1971. – **178**. – P. 95–110.
5. *Wittenberg B. A., Wittenberg J. B., Caldwell P. R. B.* Role of myoglobin in the oxygen supply to red skeletal muscle // *J. Biol. Chem.* – 1975. – **250**. – P. 9038–9043.

Київський національний університет  
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 13.09.2013

Академик НАН Украины Л. А. Булавин, Д. А. Гаврюшенко, О. В. Коробко,  
В. М. Сысоев, К. В. Червко

### Диффузионные потоки и производство энтропии в плоскопараллельной поре в случае идеального раствора

*Получены выражения для определения величины потока диффундирующего вещества и производства энтропии в плоскопараллельном слое с осмотическими краевыми условиями при наличии процессов диффузии для бинарного идеального раствора в рамках линейной термодинамики необратимых процессов. Показано, что последовательный учет зависимости коэффициента диффузии от полевых переменных приводит к существенному отличию зависимости потока вещества и производства энтропии в системе от значений, полученных в рамках распространенного подхода с постоянным коэффициентом диффузии. Качественно описаны существующие экспериментальные данные по облегченной диффузии в биологических системах в рамках общей теории диффузии с учетом исключительно энтропийных эффектов без введения искусственных добавок.*

Academician of the NAS of Ukraine **L. A. Bulavin, D. A. Gavryushenko,**  
**O. V. Korobko, V. M. Sysoev, K. V. Cherevko**

### **Diffusive flows and entropy production in a plane-parallel layer for the ideal solution approximation**

*Equations for the evaluation of the diffusive flow and the entropy production in a plane-parallel layer with the osmotic boundary condition are obtained for the case of the diffusive process in the binary ideal solutions within the irreversible thermodynamics. It is shown that the dependence of the diffusion coefficient on the field variables leads to the considerable difference between the obtained results for the diffusive flow and the entropy production and those obtained in the common approach with the constant diffusion coefficient. The experimental data for the facilitated diffusion in the biological systems are qualitatively described within the general diffusion theory with no artificial correction terms being added even for the case of considering only the entropy effects.*



УДК 538.915

П. К. Ніколюк, А. В. Ющенко, В. А. Стасенко, В. Я. Ніколайчук

### Дегібридизація в сполуках $RAl_2Si_2$

(Представлено членом-кореспондентом НАН України В. Б. Молодкіним)

*Теоретично розглянуто явище дегібридизації для інтерметалічних ізоструктурних сполук ряду  $RAl_2Si_2$  ( $R$  – Sm, Eu, Gd, Tb, Er, Yb). Показано фізичну природу виникнення  $\delta$ -подібного піка, величина якого пропорційна кількості вузлів ( $N$ ), утворених структурними елементами R–Si. У порівнянні з одиначною домішкою величина  $\delta$ -подібного піка зростає в  $N$  разів. Це зумовлено тим, що орбіталі R–Si відіграють роль електронних дефектів, періодично розташованих у межах всієї кристалічної решітки. Проведені експериментальні й теоретичні дослідження показали високу ступінь кореляції та самоузгодженості, що дозволяє розглядати атомні зв'язки R–Si як своєрідні електронні дефекти, сильно збурюючи електронну систему сполук ряду  $RAl_2Si_2$ . Таке збурення проявляється у виникненні інтенсивних резонансних піків електронних станів, які формуються у валентній зоні досліджуваних інтерметалідів в результаті дії дегібридизаційного фактора.*

Дослідженню явища дегібридизації присвячена дана робота, яка має узагальнюючий характер і спрямована на систематизацію отриманих результатів. В інтерметалічних ізоструктурних сполуках ряду  $RAl_2Si_2$  ( $R$  – Sm, Eu, Gd, Tb, Er, Yb) такий феномен описаний у наукових публікаціях [1–3], в яких отримано і зіставлено в єдиній енергетичній шкалі  $K\beta_{1,x}$ -й  $L_{2,3}$ -смуги емісії Si й Al. Рентгенівські емісійні смуги Al й Si у сполуках  $ErAl_2Si_2$ ,  $GdAl_2Si_2$  й  $EuAl_2Si_2$ , що зіставлені в єдиній енергетичній шкалі за допомогою рентгеноелектронних даних, ілюструє рис. 1. У вказаних сполуках спостерігаються специфічні трансформації емісійних смуг обох компонентів, але особливо  $L_{2,3}$ -смуг Al. Характерною особливістю є те, що вказані смуги складаються з інтенсивних високо- і низькоенергетичних піків (піки А та С див. на рис. 1), розділених глибоким мінімумом. При цьому виявляється, що має місце точний збіг максимумів  $SiK\beta_{1,x}$ -смуг (маркер В див. на рис. 1) з мінімумами розділених  $AlL_{2,3}$ -смуг (як правило,  $L_{2,3}$ -спектри Al в сполуках різного роду характеризуються монотонним розподілом інтенсивності з лише одним максимумом [4]). Треба зауважити, що при дослідженні сполук рентгеноспектральним та рентгеноелектронним методами в електронно-енергетичних діаграмах зазвичай спостерігається більше або менше виражена гібридизація електронних станів — прояв електронних станів одного компонента сполуки в спектрах

© П. К. Ніколюк, А. В. Ющенко, В. А. Стасенко, В. Я. Ніколайчук, 2014

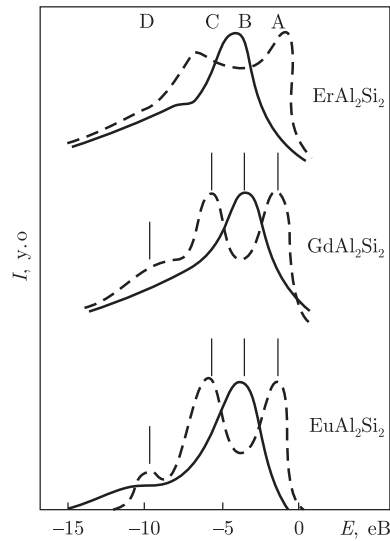


Рис. 1. Електронна структура валентної зони сполук ряду  $RAl_2Si_2$  ( $R$  — Er, Gd, Eu), що ілюструє явище дегібридації:  $SiK\beta_{1,x}$  — смуга емісії (суцільна лінія);  $AlL_{2,3}$  — смуга (пунктир). Смуги зіставлені в єдиній енергетичній шкалі за рентгеноелектронними даними. Маркерам А, В, С й D сполуки  $ErAl_2Si_2$  відповідають вертикальні мітки над спектрами сполук  $GdAl_2Si_2$  та  $EuAl_2Si_2$

іншого. Наприклад, фундаментальне дослідження Є. О. Жураковського по бінарних силіцидах і германідах [4] показує в спектрах сполук різного роду тільки гібридаційні ефекти. Так само аналогічна ситуація спостерігається в роботах [5–7]. Отже, в нашому випадку ми маємо справу з особливою, специфічною ситуацією.

Дегібридація — антипод гібридації. Фізична суть дегібридації в тому, що гібридна  $K\beta_{1,x}$ -смуга Si є енергетично стійкою і тому не утворює хімічних зв'язків з Al, а навпаки, спричиняє розділення  $s(d)$ -станів цього металу ( $L_{2,3}$ -смуга), внаслідок чого з'являються інтенсивні низько- й високоенергетичні резонанси на його  $L_{2,3}$ -смугах, що розділені мінімумом, на який припадає центр мас  $K\beta_{1,x}$ -смуги кремнію.

Явище має ряд важливих наслідків. По-перше, спостерігається енергетичне зміщення — як в низько-, так і у високоенергетичний бік — електронних станів  $s(d)$ -симетрії Al під впливом енергетично стійких електронних станів Si. По-друге, густина електронних станів на рівні Фермі сполуки сильно зростає [2]. По-третє, різких змін зазнають фізичні властивості таких об'єктів [1–3].

Роль гібридних енергетично стійких станів відіграють двоцентрові валентнозв'язуючі орбіталі типу  $(3spd)_{Si}-(4f5d6s)_R$  [2, 3], наявність яких власне і спричиняє енергетичну стійкість гібридної  $SiK\beta_{1,x}$ -смуги. Тут слід відзначити, що між елементами сполук типу  $RAl_2Si_2$  має місце як гібридація типу  $R-Si$ , так і її антипод — дегібридація: між орбіталами  $R-Si$ , з одного боку, та Al — з іншого.

Таким чином, явище дегібридації є фактично проявом сепарації валентних орбіталей у складних (багатокомпонентних) сполуках, де електровід'ємності хоча б двох компонентів істотно різняться, що приводить до формування стійких електронних конфігурацій між двома елементами з різко відмінними електровід'ємностями  $\chi$  (у даному випадку максимальна різниця  $\chi$  має місце якраз для Si й R). Третій компонент з проміжним значенням  $\chi$  (у даному випадку Al) якраз і проявляє тенденцію до сепарації електронних станів. Власне тому в даному випадку можна говорити про дегібридаційно-гібридаційні ефекти.

Теоретична модель явища дегібридизації детально описана в статті [8], де на прикладі купратних сполук розроблений математичний апарат такого феномена. Зауважимо, що явище має універсальний характер, оскільки проявляється як у сполуках різного компонентного складу, так і різних структурних типів [8].

Застосувавши алгоритм [8], для густини електронних станів  $g(E)$  в околі рівня Фермі матимемо:

$$g(E) = g_0(E) + N\delta(E - E_L), \quad (1)$$

де  $g_0(E)$  — густина електронних станів у незбуреному стані;  $E_L$  — енергія локалізованого  $\delta$ -подібного резонансного піка,  $N$  — кількість вузлів, утворених структурними елементами  $R$ -Si.

З формули (1) випливає, що в порівнянні з одиничною домішкою, величина  $\delta$ -подібного піка зростає в  $N$  разів. Це обумовлено тим, що орбіталі  $R$ -Si відіграють роль електронних дефектів, періодично розташованих у межах всієї кристалічної решітки і збурюючих валентну електронну систему сполуки.

Отримані в серії робіт як експериментальні, так і теоретичні результати [1–3, 8] підтверджують факт зростання густини електронних станів в області прифермієвських енергій. Описані особливості можуть мати широкий спектр наслідків, тому що спричиняють зміни в густині станів в зоні прифермієвських енергій. Останні, як відомо, істотно впливають на кінетичні, магнітні, калориметричні, надпровідні та інші властивості сполук, що визначаються структурною розподілу та заселеністю саме прифермієвських електронних рівнів. Дослідження в даному напрямі надзвичайно перспективні, тому що дають ключ для синтезу нових матеріалів на основі алгоритму, вказаного вище. Сформулюємо цей алгоритм у компактному вигляді: *для отримання сполук з різко аномальними властивостями необхідно синтезувати матеріали, що містять у своєму складі як мінімум три компоненти з різко відмінними величинами електровід'ємностей.*

1. Ніколюк П. К. Явище дегібридизації електронних станів в сполуках  $\text{SmAl}_2\text{Si}_2$  та  $\text{EuAl}_2\text{Si}_2$  // *Металлофіз. новейш. технології.* – 2001. – **23**, № 1. – С. 27–33.
2. Ніколюк П. К. Дегібридизація в сполуках  $\text{GdAl}_2\text{Si}_2$  та  $\text{ErAl}_2\text{Si}_2$  // Там же. – 2001. – **23**, № 8. – С. 1111–1116.
3. Ніколюк П. К., Зузяк П. М., Мартинюк В. Д. та ін. Дегібридизація в сполуках  $\text{TbAl}_2\text{Si}_2$  та  $\text{YbAl}_2\text{Si}_2$  // Там же. – 2002. – **24**, № 11. – С. 1477–1482.
4. Жураковський Е. А., Францевич І. Н. Рентгеновские спектры и электронная структура силицидов и германидов. – Киев: Наук. думка, 1981. – С. 46–299.
5. Jarlborg T., Barbiellini B., Markiewicz R. S., Bansil A. Different doping from apical and planar oxygen vacancies in  $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$  and  $\text{La}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ : First principles band structure calculations // *Phys. Rev. B.* – 2012. – **86**. – P. 235111.
6. Jacobs T., Catterve S. O., Motzkau H. et al. Electron-tunneling measurements of low- $T_C$  single-layer  $\text{Bi}_{2+x}\text{Sr}_{2-y}\text{CuO}_{6+\delta}$ : Evidence for a scaling disparity between superconducting and pseudogap states // *Ibid.* – 2012. – **86**. – P. 214506.
7. Plonka N., Kemper A. F., Graser S. et al. Tunneling spectroscopic for probing orbital anisotropy in iron pnictides // *Ibid.* – 2013. – **88**. – P. 174518.
8. Ніколюк П. К., Ніколайчук В. Я., Дзись В. Г. та ін. Явище дегібридизації в купратах // *Доп. НАН України.* – 2007. – № 5. – С. 104–109.

Вінницьке регіональне відділення  
Українського Союзу промисловців  
і підприємців України

Надійшло до редакції 10.12.2013

П. К. Николук, А. В. Ющенко, В. А. Стасенко, В. Я. Николайчук

### Дегибридизация в соединениях $RA_2Si_2$

*Теоретически рассмотрено явление дегибридизации для интерметаллических изоструктурных соединений ряда  $RA_2Si_2$  ( $R$  – Sm, Eu, Gd, Tb, Er, Yb). Показана физическая природа возникновения  $\delta$ -образного пика, величина которого пропорциональна количеству узлов ( $N$ ), образованных структурными элементами R–Si. По сравнению с единичной примесью величина  $\delta$ -образного пика возрастает в  $N$  раз. Это обусловлено тем, что орбитали R–Si играют роль электронных дефектов, периодически расположенных в пределах всей кристаллической решетки. Проведенные экспериментальные и теоретические исследования показали высокую степень корреляции и самосогласованности, что позволяет рассматривать атомные связи R–Si как своеобразные электронные дефекты, сильно возмущающие электронную систему соединений ряда  $RA_2Si_2$ . Такое возмущение проявляется в возникновении интенсивных резонансных пиков электронных состояний, формирующихся в валентной зоне изучаемых интерметаллидов в результате действия дегибридизационного фактора.*

P. K. Nikolyuk, A. V. Yushchenko, V. A. Stasenko, V. Ya. Nikolaichuk

### Dehybridization in $RA_2Si_2$ compounds

*The theoretical consideration of the dehybridization phenomenon for intermetallic isostructural compounds of the  $RA_2Si_2$  ( $R$  – Sm, Eu, Gd, Tb, Er, Yb) row has been performed. The physical nature of the occasion of a  $\delta$ -like hump, value of which is proportional to the number of lattice sites  $N$  formed by R–Si structural elements, is clarified. In comparison with a single admixture, the value of  $\delta$ -like hump is more by  $N$  times. This is caused by that the orbitals R–Si play the role of electronic defects, which are periodically located in the frame of the crystal. The performed theoretical and experimental investigations show a great degree of correlation and self-consistency. This gives possibility to view R–Si bonds as specific electronic defects, which strongly perturb the electronic system of  $RA_2Si_2$  compounds. Such perturbation is displayed in arising the intense resonance humps of electronic states, which are formed in the valence zone of the intermetallids under study as a result of the dehybridization factor action.*



УДК 528.813:(633.1:553.981)(477)

С. С. Дугін

## Оцінка і вибір полігонів для наземної завірки інформації космічного геомоніторингу

(Представлено членом-кореспондентом НАН України О. Д. Федоровським)

*Обґрунтовано методикау формалізованого аналізу альтернативних варіантів існуючих наземних полігонів України на основі методу аналізу ієрархій. Подано їх критеріальну оцінку шляхом визначення пріоритетів для конкретної номенклатури тематичних задач дистанційного зондування Землі. Здійснено вибір полігонів наземної завірки інформації космічного геомоніторингу з наступним спектрометричним дослідженням об'єктів спостереження.*

Для завірки результатів космічного геомоніторингу використовують наземні полігони з відповідними тест-ділянками та еталон-об'єктами. Оцінка і вибір мережі полігонів виконуються, враховуючи ландшафтно-кліматичні зони України, специфіку тематичних завдань дистанційного зондування Землі (ДЗЗ) та наявність діючої мережі наземних полігонів. Таким чином, щоб забезпечити необхідну наземну завірку космічної інформації ДЗЗ, полігони повинні задовольняти певним вимогам. У монографії [1] наводяться такі категорії вимог: структура, випромінювально-відбивні характеристики, географічне розташування і розміри, методичне і технічне забезпечення, сертифікація.

Структура полігону розробляється на етапі його створення відповідно до можливостей місцевої екосистеми та переліку тематичних задач ДЗЗ.

Випромінювально-відбивні характеристики підстилаючої поверхні тестових ділянок повинні мати коефіцієнт відбиття в заданому спектральному діапазоні не менше 0,3; поверхня має бути близькою до ламбертовської; форма спектральної характеристики повинна бути в межах робочого спектрального інтервалу досить плоскою і стабільною.

**Географічне розташування і розміри.** При виборі місця розташування наземного полігону ДЗЗ слід брати до уваги насамперед ландшафтно-кліматичні та геолого-геоморфологічні особливості території, оскільки місцевий клімат, характерна рослинність і рельєф визначають структуру полігону і склад тестових об'єктів.

---

© С. С. Дугін, 2014

Методичне і технічне забезпечення для нормального функціонування тестових ділянок полігонів має включати великий обсяг польових вимірювань і спостережень [2]. Це вибір параметрів, що підлягають вимірюванню, обґрунтування необхідної точності і періодичності вимірювань, а саме: інтегральних і спектральних характеристик відбиття, поглинання і пропускання, а також вологості і геохімічного складу ґрунту земної підстилаючої поверхні [3].

**Сертифікація.** Відповідно до міжнародних правил, кожен полігон ДЗЗ проходить процедуру сертифікації і паспортизується. В Україні загальні положення і порядок сертифікації викладені в стандартах [4, 5].

У зв'язку з тим, що в Україні існує мережа полігонів з тестовими ділянками різного призначення та технічного стану для наземної завірки (валідації) результатів дешифрування космічних знімків, верифікації нових методик ДЗЗ, формування тест-ділянок і дослідження випромінювально-відбивних спектральних характеристик об'єктів спостереження, виникає практична проблема оцінки й вибору відповідного складу полігонів і тестових ділянок, параметри яких найбільш відповідають заданим тематичним задачам і сформульованим вище вимогам.

Мета даної роботи полягає в обґрунтуванні методики формалізованого аналізу альтернативних варіантів існуючих полігонів, їх критеріальної оцінки і вибору на основі максимального значення пріоритетів для конкретної номенклатури тематичних задач ДЗЗ полігонів з відповідними тест-ділянками для подальшого профілювання і спектрометричних досліджень в рамках вирішення поставлених тематичних задач ДЗЗ. Так як аналіз і оцінка альтернативних варіантів полігонів неможливі за абсолютним значенням одного з параметрів (критеріїв), а лише за відносним зіставленням багатьох параметрів шляхом попарних експертних порівнянь ступеня переваги по кожному з них, то для досягнення поставленої мети найбільше підходить метод аналізу ієрархій (Analytic Hierarchy Process), заснований Сааті (США) на лінгвістичному підході та експертній інформації [6].

Метод аналізу ієрархій (МАІ) дає змогу на основі експертних оцінок сформувати необхідну цільову функцію, рейтингувати альтернативні варіанти. Метод має кілька етапів [7, 8]. Перший — полягає в структуризації задачі у вигляді ієрархічної структури з кількома рівнями: цілі — критерії — альтернативи. На другому — експерт виконує попарні порівняння елементів кожного рівня. Найбільш відповідальним етапом є побудова ієрархії суджень між початковим (мета, яка буде досягнута в процесі розв'язання задачі) і останнім рівнями. Результати порівнянь елементів кожного рівня переводяться в числа. Далі обчислюються коефіцієнти важливості для елементів кожного рівня. Перевіряється узгодженість суджень експертів. Підраховується кількісний узагальнений критерій якості кожної з альтернатив і визначається найкраща альтернатива.

Згідно з вказаним методом, було розроблено ієрархічну модель (табл. 1), у якій на нульовому рівні сформульоване головне завдання — оцінка наземних полігонів для завірки інформації космічного геомоніторингу. Для кожного наступного рівня сформовані складові (критерії), оцінка яких повинна виконуватися, виходячи із принципів синергетики з урахуванням всіх аспектів функціонування наземних полігонів.

Коли розглянута проблема представлена ієрархічно, для формалізації експертної процедури будується множина матриць попарних порівнянь для кожного рівня і по кожній складовій даного ієрархічного рівня. Метою побудови множини матриць є кількісне визначення коефіцієнтів відносної пріоритетності показників, які утворюють ієрархію. Відповідно специфіки методу необхідно, щоб всі елементи лежачого нижче рівня ієрархії були порівняні експертом попарно стосовно кожного елемента лежачого вище рівня.



Таблиця 1. Ієрархічна модель оцінки і вибору космічних завірочних полігонів для забезпечення рішення тематичних завдань ДЗЗ

<i>Рівень 0. Оцінка наземних полігонів для завірки інформації космічного геомоніторингу</i>																	
<i>Рівень 1. Основні напрями використання космічної інформації ДЗЗ</i>																	
Екологія і НС				Геологія				Сільське господарство				Геодезія та картографія					
<i>Рівень 2. Тематичні задачі космічного геомоніторингу ДЗЗ</i>																	
2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9	2.10	2.11							
Оцінка пожежної безпеки території	Моніторинг міських агломерацій	Моніторинг екостану водойм	Моніторинг рослинного покриву	Визначення видового складу лісів	Пошук покладів корисних копалин	Дослідження геологічних структур ландшафтно-кліматичних зон	Окреслення видових угруповань	Оцінка агрокультур і врожайності	Картографування продуктивності екосистем	Картографування розповсюдження спричинених стресів							
<i>Рівень 3. Основні вимоги до полігонів</i>																	
Географічне положення			Відповідність даних наземної і космічної зйомки				Орбітальне покриття поверхні спостереження і періодичність КА				Випромінювально-відбивні характеристики						
<i>Рівень 4. Основні наземні полігони України</i>																	
4.1	4.2	4.3	4.4	4.5	4.6	4.7	4.8	4.9	4.10	4.11	4.12	4.13	4.14	4.15	4.16	4.17	4.18
Шацький	Київський (Міський)	Київський (Агро)	Вінницький	Миколаївський	Роменський	Карпатський	Кримський (Тарханкут)	Кримський (Каївелі)	Кримський (Керч)	Яворівський	Степовий заповідник	Харківський лісний полігон	Заповідник "Асканія Нова"	Заповідник "Еланецький"	Дунайський заповідник	Полігон "Чауда"	Кримський (НЦУКВКЗ)
<i>Значення узагальненого критерію <math>F \cdot 10^3</math> для порівнюваних полігонів</i>																	
14	5,7	7,1	12	9,0	4,3	6,0	9,5	3,5	2,3	2,8	6,9	3,4	4,3	2,5	5,6	3,8	2,3

При цьому зіставлення відбувається не за абсолютними значеннями, а за ступенем відносної переваги кожного параметра. Наведена процедура виконується на кожному ієрархічному рівні, включаючи останній, для якого вираховуються пріоритети з точки зору ступеня їх впливу на передостанній рівень. У результаті система переваг подається квадратною матрицею. Елементами матриці — відношення абсолютних пріоритетів експертів — є оцінки, судження експерта або їх групи про відносну важливість окремих параметрів, що порівнюються по відношенню до критерію, більш високого рівня, із заданою попередньо шкалою оцінок (шкали переваг від 1 до 9 балів). На нульовому рівні сформульована мета досліджень: оцінка наземних полігонів для завірки інформації космічного геомоніторингу. На першому рівні оцінюється вплив основних напрямів використання космічної інформації ДЗЗ на формування характеристик наземних полігонів завірки інформації космічного геомоніторингу. Це такі напрями: екологія і надзвичайні ситуації (НС), геологія (пошук корисних копалин і природні ресурси), сільське господарство, геодезія та картографія. При цьому враховуються вид та об'єми наземної завірки космічної інформації ДЗЗ, які в кожному напрямі різні.

У межах кожного напрямку використання космічної інформації ДЗЗ вирішуються різні тематичні задачі ДЗЗ. Їхня пріоритетність стосовно попереднього рівня також визначається експертом або групою експертів, що становить наступний другий рівень ієрархічної моделі. Розв'язання тематичних задач ДЗЗ пов'язане з завіркою космічної інформації геомоніторингу на наземних полігонах, характеристики яких повинні відповідати основним вимогам, що виходять з тематичних задач ДЗЗ. Ступінь впливу вимог до полігонів на якість наземної завірки і відповідно на виконання кожної тематичної задачі ДЗЗ визначається експертом на третьому рівні моделі. Відзначимо, що із наведених вище вимог до полігонів були використані такі: випромінювально-відбивні характеристики і географічне положення (відповідність ландшафтно-кліматичним зонам). Додатково були включені: орбітальне покриття поверхні спостереження і періодичність космічних апаратів (КА) та відповідність даних наземної і космічної гіперспектральних зйомок.

Можливість орбітального покриття певних районів є ключовим елементом при виборі географічного положення полігону. Виділяють два важливих елементи при оцінці покриття: миттєве поле зору — площа, що переглядається приладом у будь-який довільний момент, і швидкість покриття — швидкість, із якою нова поверхня потрапляє в поле зору при русі супутника. Час повторного огляду (Revisit time-RT) — це показник, звичайно використовуваний для оцінки орбітальних угруповань, які не досягають безперервного покриття області на поверхні Землі. Час повторного огляду це час, за який дане місце розташування на Землі не спостерігається орбітальною системою КА. Кращим визнається такий варіант угруповання, для якого значення критерію покриття (RT) найменше. Максимальний час повторного огляду всіх об'єктів, розташованих на території України, становить 2,7 доби [9]. Відповідність даних наземної і космічної гіперспектральних зйомок при наявності відмінностей в геометрії їх спостережень забезпечується створенням бази еталонних спектрів шляхом спектрометрування об'єктів спостереження під різними кутами [10–13].

На четвертому рівні ієрархічної моделі виконується попарне порівняння полігонів з точки зору їх відповідності вищезгаданим вимогам. У тому числі, враховувалась експертна інформація, яка була отримана в результаті аналізу тематичних задач ДЗЗ і характеристик полігонів.

На наступному етапі для кожної з матриць попарних порівнянь розраховуються компоненти власного вектора матриці [6]:

$$\alpha_1 = \left( \prod_{j=1}^n \alpha_{1j} \right)^{1/n}, \quad \dots, \quad \alpha_n = \left( \prod_{j=1}^n \alpha_{nj} \right)^{1/n}, \quad (1)$$

де  $i, j = 1, \dots, n$  — число критеріїв, порівнюваних на кожному рівні.

З отриманих груп матриць визначаються нормальні оцінки вектора локальних пріоритетів:

$$K_i = \frac{\alpha_1}{\sum_i \alpha_i}, \quad \dots, \quad K_n = \frac{\alpha_n}{\sum_i \alpha_i}. \quad (2)$$

Як приклад, розглянемо докладніше перший рівень. Згідно з ієрархічною моделлю, кожний з чотирьох напрямів характеризується своєю питомою вагою (коефіцієнтом важливості) з точки зору використання наземних полігонів для завірки інформації космічного геомоніторингу. Для розрахунку цих коефіцієнтів будується таблиця переваг (табл. 2), яка складається з матриці (4-го порядку) попарних порівнянь напрямів використання космічної інформації ДЗЗ, стовпчиків послідовного обчислення (2) вагових коефіцієнтів (вектора переваг) та стовпчика обчислення максимального (головного) власного значення матриці порівнянь  $\lambda_{\max}$ , яке використовується для оцінки узгодженості [6].

До клітин матриці записуються результати попарних порівнянь складових залежно від їхньої значущості стосовно мети (оцінка наземних завірочних полігонів ДЗЗ). У результаті обробки матриць визначалися вектори пріоритетів для кожного рівня, компоненти яких визначають їхні пріоритети з погляду експерта. Після того як компоненти власного вектора отримані для всіх  $n$  рядів матриці за формулою (2) визначається вектор локальних пріоритетів критеріальних складових кожного рівня ієрархії. Далі за значеннями векторів локальних пріоритетів  $K^1, K^2, K^3$  і  $K^4$  знаходяться значення згортки узагальненого критерію для порівнюваних полігонів:

$$F = \sum K_l^1 \sum K_m^2 \sum K_r^3 \sum K_p^4 x_p^s, \quad (3)$$

де верхнім індексом критеріального пріоритету позначений рівень ієрархії;  $x_p^s$  — коефіцієнт переваги полігону  $s$  за показником  $p$ .

Таблиця 2. Матриця попарних порівнянь першого рівня

Основні напрями використання космічної інформації ДЗЗ	Екологія і НС	Геологія	Сільське господарство	Геодезія та картографія	$\prod_{j=1}^n \alpha_{1j}$	$\alpha_n = \left( \prod_{j=1}^n \alpha_{nj} \right)^{1/n}$	$K_i = \frac{\alpha_1}{\sum_i \alpha_i}$	$\lambda_{\max}$
Екологія і НС	1	2	3	4	24	2,2133638	0,466851	0,972591
Геологія	0,5	1	2	3	3	1,3160740	0,277591	1,064091
Сільське господарство	0,3333	0,5	1	2	0,3333	0,7598166	0,1602635	1,041713
Геодезія та картографія	0,25	0,3333	0,5	1	0,04166	0,4517897	0,095293	0,952932
Сума	2,0833	3,8333	6,5	10		4,74104	1	4,031329

Отже, після отримання всіх необхідних вагових коефіцієнтів маємо формулу згортки узагальненого критерію для порівнюваних полігонів. Зіставлення значень згортки узагальненого критерію  $F$  для порівнюваних полігонів дозволяє оцінити їх придатність для завірки інформації космічного геомоніторингу і вирішення тематичних завдань ДЗЗ за всією сукупністю складових (див. значення  $F$ , ієрархічну модель у табл. 1).

На основі отриманих критеріальних оцінок  $F$  з урахуванням ландшафтно-кліматичних зон України та фактичного стану полігонів для їх досліджень і використання були вибрані такі наземні полігони: Київський міський та Київський агрообласний, Шацький, Вінницький, Миколаївський та Кримський (Тарханкут). На цих шести полігонах були вибрані контрольні точки, які визначають найбільш характерні ландшафтні угруповання та найбільш повно описують притаманну місцевості рослинність.

На тест-ділянках Київського міського та Київського агрообласного полігонів вибрано точки для наземної спектрометрії рослинності з метою зіставлення даних наземної гіперспектральної зйомки та даних супутникового сенсору “Нурегіон” для визначення змін наземного покриття за індексами червоного краю, оскільки ДЗЗ за допомогою супутникових гіперспектральних сенсорів є ефективним інформативним інструментом для тривалого моніторингу рослинного покриття.

На Шацькому полігоні (*Полісся*) було проведено спектрометричне вимірювання земних покривів для подальшої обробки та відпрацювання методик верифікації та калібрування даних супутникового спостереження Землі.

Вінницький полігон (*Лісостеп*) розташований на горбистій рівнині і має широко хвилястий характер поверхні. Відноситься до лесових рівнин поза льодовикової області, сильно розчленованих та терасованих долиною Пд. Бугу.

У межах Миколаївського полігону (*Степ*) було обстежено 114 посівів сільськогосподарських культур Новоодеського, Миколаївського, Жовтневого та Очаківського районів, з них 35 посівів соняшнику, 13 — ярого ячменю, 12 — озимого ячменю, 24 — озимої пшениці, 10 — озимого ріпаку. Зафіксовано також посіви озимого жита, ярої пшениці, вівса, гречки, кукурудзи, помідорів на зрошенні та полях, що перебувають під паром.

На Кримському (Тарханкут) полігоні (*Степ*) виконувались вимірювання спектральних характеристик для виявлення зон глибинних розломів за даними гіперспектральних супутникових зйомок. Відомо, що більш високі об’єми міграції вуглеводнів із родовищ нафти і газу звичайно спостерігаються в зонах розломів, а найбільш активно ці процеси відбуваються з газових родовищ.

Достовірність отриманих розрахункових даних істотно залежить від виконання умов узгодженості в матрицях порівнянь. Оцінка ступеня узгодженості вихідних даних здійснювалася шляхом розрахунку індексу узгодженості (ІУ) та обчислення відносної узгодженості (ВУ) для кожної матриці. ІУ надає інформацію про ступінь порушення числової та транзитивної узгодженості. ІУ й ВУ розраховуються за формулами [14]:

$$ІУ = \frac{\lambda_{\max} - n}{n - 1}, \quad (4)$$

$$ВУ = \frac{ІУ}{I_n}, \quad (5)$$

де  $\lambda_{\max}$  — максимальне власне значення матриці порівняння;  $n$  — порядок матриці, що визначається числом порівнюваних елементів;  $I_n$  — індекс узгодженості для оберненої метричної матриці порядку  $n$  випадкових оцінок. Значення  $I_n$  визначаються: 1 — 0,00; 2 — 0,00;

3 – 0,58; 4 – 0,90; 5 – 1,12; 6 – 1,24; 7 – 1,32; 8 – 1,41; 9 – 1,45; 10 – 1,49; 11 – 1,51; 12 – 1,48; 13 – 1,56; 14 – 1,57; 15 – 1,59.

Для прийнятної узгодженості необхідне виконання умови:

$$ВУ < 0,2. \quad (6)$$

У разі, якби умова (6) не виконувалася, слід було б повернутися до етапу формування матриць попарних порівнянь і покращити узгодженість оцінок експерта.

Наприклад, для матриці першого рівня індекс узгодженості такий (ВУ дорівнює  $\approx 1\%$ ):

$$IU = \frac{\lambda_{\max} - n}{n - 1} = \frac{4,031329 - 4}{3} = 0,010443.$$

Таким чином, обґрунтовано методика експертних оцінок для моделювання та визначення інформаційно-технічних характеристик наземних завіркових полігонів ДЗЗ. Відносна узгодженість для системи в цілому характеризує зважене середнє ВУ за всіма 19 матрицями порівнянь. При цьому узгодженість всієї ієрархії становить 0,097836, тобто  $\approx 9,8\%$ , що менше припустимих за теорією МАІ 10%.

На цій основі вибрано шість полігонів (Київський міський та Київський агрообласний, Шацький, Вінницький, Миколаївський та Кримський (Тарханкут)) для завірки результатів космічного геомоніторингу. У подальшому з урахуванням отриманого досвіду передбачається продовжити спектрометричні дослідження інших завіркових полігонів ДЗЗ України з метою їх оцінки і використання для наземної завірки інформації космічного геомоніторингу.

1. *Апостолов А. А., Белокопытов В. Н., Богуславский А. С. и др.* Изменения земных систем в Восточной Европе / Под ред. В. И. Лялько. – Киев: ПП “Фолиант”, 2010. – 581 с.
2. *Багатоспектральні методи дистанційного зондування Землі* / За ред. В. І. Лялька і М. О. Попова. – Київ: Наук. думка, 2006. – 358 с.
3. *Лялько В. И., Попов М. А.* Полигоны ДЗЗ в Украине как элемент глобальной системы GEOSS/GMES // Косм. наука і технологія. – 2008. – **14**, № 2. – С. 3–12.
4. *Попов М. О., Цимбал Т. В.* Правила та процедура сертифікації методик використання даних дистанційного зондування Землі при вирішенні тематичних задач // Там само. – 2004. – **10**, № 4. – С. 104–112.
5. *ДСТУ 2462-94.* Сертифікація. Основні поняття. Терміни та визначення. – Київ: Держспоживстандарт, 1994.
6. *Саати Т.* Принятие решений. Метод анализа иерархий. – Москва: Радио и связь, 1993. – 278 с.
7. *Батьковский А. М., Коробов С. П., Хрусталева Е. Ю.* Об одном подходе к оценке вариантов реструктуризации оборонно-промышленного комплекса // Экономика и мат. методы. – 2004. – **40**, № 1. – С. 50–68.
8. *Федоровский А. Д., Якимчук В. Г., Боднар Е. Н., Козлов З. В.* Оценка эффективности космических систем ДЗЗ на основе метода анализа иерархий // Косм. наука і технологія. – 2005. – **11**, № 3./4. – С. 75–60.
9. *Артюшенко М. В., Дугин С. С., Федоровский А. Д.* Моделирование и синтез орбитальной группировки космических аппаратов зонального наблюдения территории Украины // Там само. – 2011. – **17**, № 5. – С. 50–57.
10. *Лялько В. И., Шпортюк З. М., Сибірцева О. М. та ін.* Дослідження варіацій індексів червоного краю спектрів відбиття пшениці над газовим родовищем // Там само. – 2010. – **6**, № 6. – С. 5–10.
11. *Лялько В. И., Сахацький О. І., Шпортюк З. М., Сибірцева О. М.* Використання індексів червоного краю та водних індексів за гіперспектральними даними ЕО-1 “NuRegion” для класифікації земного покриву // Там само. – 2008. – **14**, № 3. – С. 55–68.

12. Лялько В. І., Шпортюк З. М., Сахацький О. І. та ін. Зіставлення супутникових та наземних гіперспектральних даних при визначенні позиції червоного краю спектрів відбиття // Там само. – 2010. – 16, № 3. – С. 39–45.
13. Hilker T., Lyapustin A., Hall F. G. Remote Sensing of Environment An assessment of photosynthetic light use efficiency from space: Modeling the atmospheric and directional impacts on PRI reflectance (США, Канада) // RSE. – 2009. – 113. – P. 2463–2475.
14. Саати Т., Аернс К. Аналитическое планирование. – Москва: Радио и связь, 1991. – 186 с.

ДУ “Науковий центр аерокосмічних досліджень Землі  
Інституту геологічних наук НАН України”, Київ

Надійшло до редакції 09.10.2013

**С. С. Дугин**

### **Оценка и выбор полигонов для наземной заверки информации космического геомониторинга**

*Обоснована методика формализованного анализа альтернативных вариантов существующих наземных полигонов Украины. На основе метода анализа иерархий приведена их критериальная оценка путем определения приоритетов для задач дистанционного зондирования Земли. Осуществлен выбор полигонов наземной заверки информации космического геомониторинга с дальнейшими спектроскопическими исследованиями объектов наблюдений.*

**S. S. Dugin**

### **Evaluation and choice of polygons for the ground-based certification of the information of space geomonitoring**

*We substantiate the method of formalized analysis of alternatives for the existing land polygons of Ukraine. Based on the method of analytic hierarchy, we calculated their criterial evaluation. The choice of polygons for the ground-based certification (verification) of the space geomonitoring information with the following spectrometric investigation of the objects of observation is made. For this, we calculated the priorities for a specific nomenclature of thematic tasks of the Earth Remote Sensing.*

Л. А. Ковальчук

## Моделирование динамики статистических распределений температуры воздуха посредством процесса Орнштейна–Уленбека и уравнения Фоккера–Планка

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины В. И. Осадчим)

*На основе анализа ежедневных аномалий температуры воздуха в Киеве за прошедшее столетие установлено, что экстремальная положительная аномалия естественным путем может достигнуть  $+15,13$  °C, превысив на  $1^\circ$  наблюдавшийся максимум. Климатический процесс был стабилен и не подвергался антропогенным деформациям. Предложена стохастическая модель динамики аномалий температуры воздуха, в основу которой положены “винеровские блуждания”, удерживаемые в естественных климатических границах процессом Орнштейна–Уленбека.*

**Состояние проблемы.** Экспертами дано определение климатической системы, как совокупности взаимодействующих между собой атмосферы, гидросферы, биосферы, литосферы и криосферы, а также дано определение климата, как статистического ансамбля состояний его характеристик. Однако нет определения климатического процесса, хотя такое выражение широко применяется в практике. Наша цель — обосновать возможность моделирования климатического процесса на основе теории случайных процессов [1]. В частности, посредством решения уравнения Фоккера–Планка процесса Орнштейна–Уленбека [2].

**Материал и методика.** В основу исследования положены ежедневные значения температуры воздуха в Киеве с 1900 по 2009 гг., полученные Гидрометеорологической службой Украины по результатам стандартных наблюдений, которые были очищены от детерминированной составляющей: годового хода. Из ежедневных значений температуры воздуха вычитались среднегодовые значения температуры соответствующего дня, т. е. значения медианы.

Нами климатический процесс определен, по аналогии со случайным процессом, как многомерная функция распределения вероятностей его характеристик. Рабочая гипотеза заключается в следующем: климатический процесс последнего столетия был стабилен и не подвергался антропогенным деформациям; динамику его аномалий можно описать процессом “винеровских блужданий”, удерживаемых в естественных климатических границах процессом Орнштейна–Уленбека. Проверка рабочей гипотезы потребовала: 1) обосновать естественность потепления второй половины века, т. е. определить естественный экстремальный максимум положительных аномалий; 2) минимизировать погрешности моделирования асимметричного климатического процесса посредством симметричного процесса Орнштейна–Уленбека, верифицировать результаты моделирования.

Естественный экстремальный максимум определен на основе функции распределения вероятностей (интеграла вероятностей) ежедневных аномалий температуры воздуха с 1900

по 2009 г. Сначала была определена вероятность наблюдаемого исторического экстремального минимума аномалий температуры, затем, соответственно полученной вероятности было вычислено значение естественного экстремального максимума аномалий температуры.

Погрешности моделирования минимизировались управляющими параметрами процесса Орнштейна–Уленбека и процедурой интегрирования при вычислении функции распределения вероятностей. Адекватность процесса Орнштейна–Уленбека определена по его способности долгосрочного “прогнозирования” среднегодовых и среднемесячных аномалий температуры воздуха в рамках их естественных климатических “коридоров” при наличии асимметрии распределения.

Закон статистического распределения ежедневных аномалий температуры воздуха ( $\Delta T$  °C) идентифицирован при помощи модели экспоненциального распределения [2], модифицированного для асимметричного случая:

$$p(x) = \frac{\alpha}{2\lambda\sigma\Gamma(1/\alpha)} \exp\left(-\left|\frac{x-m}{\lambda\sigma}\right|^\alpha\right), \quad (1)$$

где  $\lambda = \sqrt{\frac{\Gamma(1/\alpha)}{\Gamma(3/\alpha)}}$ ,  $\Gamma(z)$  — гамма-функция;  $m = 0$  — центр распределения  $\Delta T$ ;  $\sigma = \sigma_{\Delta T < 0}$ ,  $\sigma_{\Delta T > 0}$  — стандартные отклонения,  $\alpha = \alpha_{\Delta T < 0}$ ,  $\alpha_{\Delta T > 0}$  — некоторые характеристики распределения, которые однозначно определяют параметр формы экспоненциальных распределений — эксцесс  $\varepsilon = \varepsilon_{\Delta T < 0}$ ,  $\varepsilon_{\Delta T > 0}$ :

$$\varepsilon = \frac{\Gamma(1/\alpha)\Gamma(5/\alpha)}{(\Gamma(3/\alpha))^2}. \quad (2)$$

В связи с тем что предполагаемая вероятность исторического минимума ежедневных аномалий температуры за 110-летний период может оказаться ниже  $10^{-6}$ , погрешность идентифицируемой функции распределения вероятностей (интеграла вероятностей) аномалий температуры не должна быть  $>10^{-10}$ , а достоверность критерия согласия ( $\chi^2$ ) должна быть выше 99,9999999999%.

Большинство суждений о динамике климата основаны на анализе многолетних вариаций средних аномалий температуры. Учитывая, что вероятностное пространство климатической системы ограничено, а статистические распределения многих гидрометеорологических характеристик относятся к семейству экспоненциальных, моделирование климатического процесса значительно упрощается благодаря процессу Орнштейна–Уленбека:

$$dx = -\beta(x - \xi)dt + \sigma\delta W, \quad (3)$$

где  $x$  — среднее значение месячной аномалии температуры воздуха ( $\mu_{\Delta T}$ );  $\beta$  — коэффициент “притяжения”;  $\xi$  — равновесный уровень “притяжения”;  $t$  — время;  $\sigma$  — стандартное отклонение ( $\sigma_{\mu_{\Delta T}}$ );  $W(t)$  — бесконечно малый винеровский “шум”.

$$\delta W = \varepsilon\sqrt{dt}, \quad \varepsilon \sim N(0, 1). \quad (4)$$

Параметры  $\beta$  и  $\xi$  определялись на основе результатов наблюдений:

$$\beta = \frac{\sigma_{\mu_{\Delta T}}^2}{2R_{\mu_{\Delta T}}^2}, \quad (5)$$



здесь  $R$  — размах колебаний  $\mu_{\Delta T}$  (“коридор”);

$$\xi = \frac{\mu_{(\Delta T)k}}{\mu_{(\Delta T)h}}, \quad (6)$$

здесь  $k + h = s$  — период наблюдений.

Плотность вероятности перехода  $p(x_0, t_0 \Rightarrow x, t)$  аномалий температуры воздуха  $\Delta T$ , например, из экстремально теплого состояния в экстремально холодное состояние, оценивалась согласно решению Фоккера–Планка процесса Орнштейна–Уленбека, которое реализовано посредством формул, удобных для вычислений [3]:

$$p(x_0, t_0 \Rightarrow x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D(t, t_0)}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{[x - \bar{x}(t, t_0)]^2}{D(t, t_0)} \right\}, \quad (7)$$

где  $x$  — ежедневные аномалии температуры воздуха ( $\Delta T$ ),

$$\bar{x}(t, t_0) = \xi + (x_0 - \xi)e^{-\beta(t-t_0)}, \quad (8)$$

$$D(t, t_0) = \frac{\sigma^2}{2\beta}(1 - e^{-2\beta(t-t_0)}). \quad (9)$$

Параметры  $\xi$  и  $\beta$  определялись на основе результатов наблюдений:

$$\xi = \frac{\bar{x}_{(\Delta T)k}}{\bar{x}_{(\Delta T)h}}, \quad (10)$$

здесь  $k + h = s$  — период наблюдений;

$$\beta = \frac{\sigma^2}{2R^2}, \quad (11)$$

где  $\sigma$  — стандартное отклонение  $\Delta T$ ;  $R$  — размах колебаний  $\Delta T$  (“коридор”).

На основе полученных плотностей вероятностей перехода  $p(x_0, t_0 \Rightarrow x, t)$  при помощи интеграла вероятностей были вычислены вероятности перехода  $P(x_0, t_0 \Rightarrow x, t)$ .

**Обсуждение результатов исследований.** Функция вероятностей аномалий температуры воздуха идентифицирована с погрешностью  $10^{-13}$ , критерий согласия  $\chi^2 = 80,75$  при 86 степенях свободы имеет достоверность более 99,99999999999999%. Вычисленная вероятность экстремального исторического минимума аномалий температуры  $-25,55$  °C была равной 0,0000078. Вычисленный естественный максимум аномалий температуры воздуха, соответствующий вероятности 0,0000078, оказался равным  $+15,13$  °C, тогда как исторический максимум не превысил  $+14,15$  °C. Следовательно, естественным путем, без антропогенного воздействия, экстремальная аномалия температуры воздуха может достигнуть  $+15,13$  °C.

Адекватность процесса Орнштейна–Уленбека асимметричному климатическому процессу достигнута при помощи  $\xi$  — равновесного уровня “притяжения” (8). Установлено, что процесс Орнштейна–Уленбека адекватно моделирует, не выходя за границы размаха, возможные реализации как средних годовых, так и средне январских, и средне июльских аномалий температуры воздуха. Однако сами “блуждающие” траектории, в силу бесконечной малости винеровского “шума” (2), не следует рассматривать в качестве конкретных будущих реализаций средних аномалий температуры, так как они сами являются совокупностями множества реализаций. В случае “прогноза” средних годовых аномалий температуры на

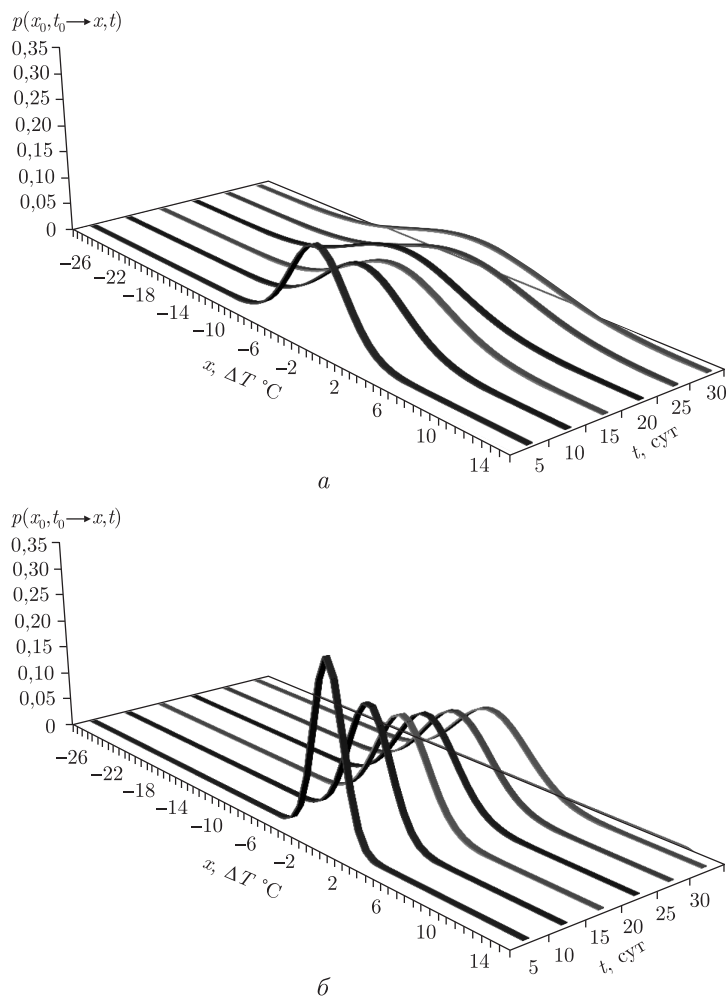


Рис. 1. Плотность вероятности перехода  $p(x_0, t_0 \rightarrow x, t)$  аномалий температуры воздуха  $\Delta T$  °С по суткам в январе (а) и июле (б)

несколько лет вперед при  $\Delta t = 5$  сут в течение первых двух лет реализации не выходили за пределы  $\pm 1$  °С, но, выполняя тот же “прогноз” при  $\Delta t = 4$  ч, реализации приблизились бы к своим границам значительно раньше. Подтверждение тому “прогноз” средне январских аномалий температуры на несколько месяцев вперед при  $\Delta t = 4$  ч, когда уже через месяц-полтора реализации колебались в пределах  $\pm 4$  °С, а также “прогноз” средне июльских аномалий температуры при  $\Delta t = 4$  ч, когда уже через декаду реализации достигли нижней границы “коридора” — 3 °С.

Блуждание “прогнозных” средне январских или средне июльских аномалий температуры воздуха отражалось на вероятностях перехода от текущего значения средней аномалии к своему возможному значению, что проявилось в плавно искривленных по координате времени траекториях максимума плотности вероятности перехода  $p(x_0, t_0 \Rightarrow x, t)$  (рис. 1). Существенные различия в форме январских и июльских кривых плотностей вероятностей перехода обусловлены превышением в 3,5 раза январской дисперсии над июльской дисперсией аномалий температуры воздуха. Именно рост дисперсии с увеличением заблаговременности “прогноза” приводит к “расползанию” области возможных реализаций аномалий

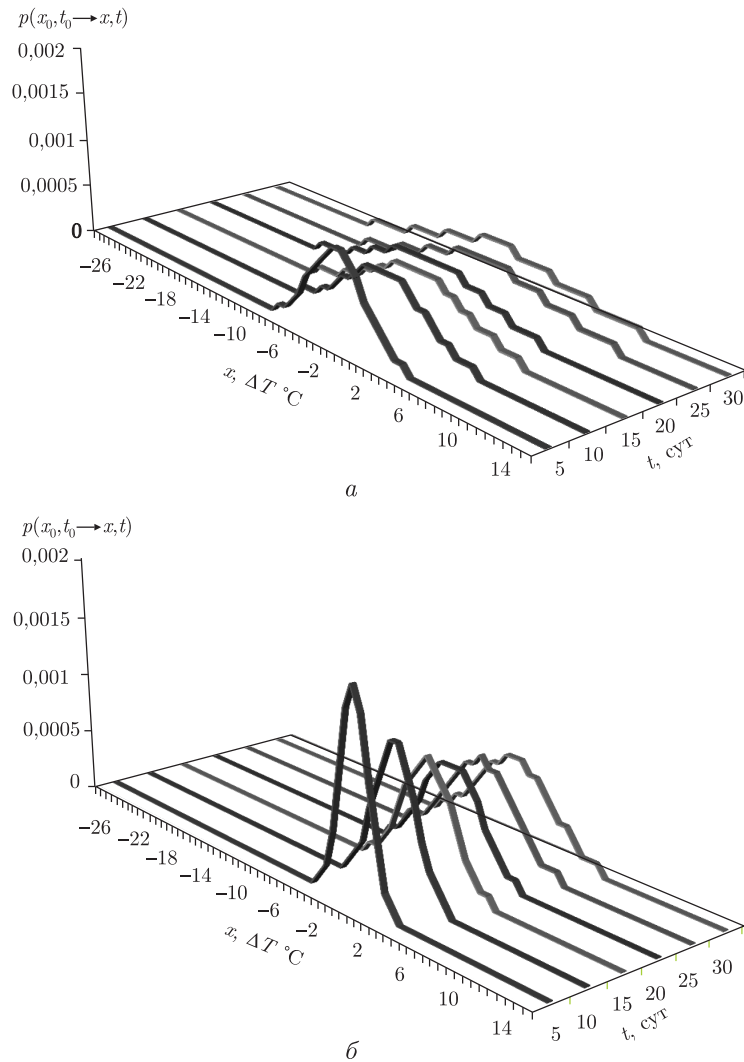


Рис. 2. Вероятности перехода  $p(x_0, t_0 \rightarrow x, t)$  аномалий температуры воздуха  $\Delta T$  °C по суткам в январе (а) и июле (б).

Волнистость перехода  $p(x_0, t_0 \rightarrow x, t)$  обусловлена “не идеальной гладкостью”  $p(x_0, t_0 \rightarrow x, t)$

температуры воздуха, т. е. неопределенности. Если в январе на 5-е сут диапазон неопределенности распространялся от  $-8$  до  $+5$  °C, то на 30-е сут неопределенность охватывала уже от  $-15$  до  $+10$  °C, что привело к уменьшению максимума плотности вероятности перехода за тот же период в 2,1 раза от 0,15 до 0,07. В июле на 5-е сут неопределенность находилась в пределах от  $-4$  до  $+3$  °C, а на 30-е сут — от  $-8$  до  $+7$  °C, при этом максимум плотности вероятности перехода уменьшился от 0,30 до 0,11. Следовательно, более интенсивный рост дисперсии вероятности перехода, т. е. неопределенности, относительно изменчивости средних аномалий температуры объясняет непредсказуемость далее 5-ти сут абсолютных значений аномалий температуры.

Зависимость вероятности перехода  $P(x_0, t_0 \Rightarrow x, t)$  от дисперсии оказалась подобной зависимости от нее плотности вероятности перехода  $p(x_0, t_0 \Rightarrow x, t)$ . В январе, вероятность сохранения средней аномалии температуры на 5-е сут оказалась равной 0,0009, что на по-

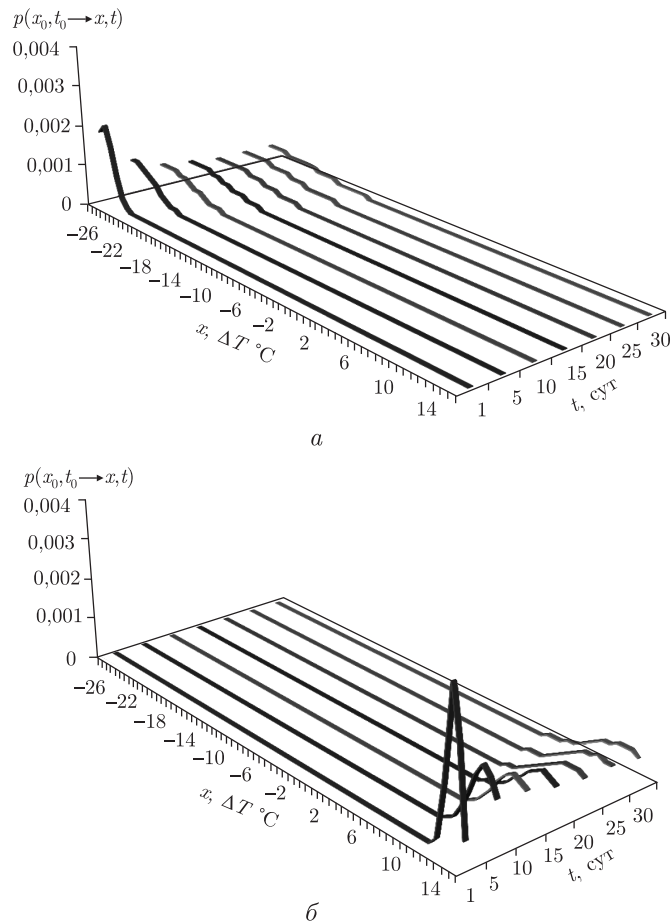


Рис. 3. Вероятность перехода  $p(x_0, t_0 \rightarrow x, t)$  экстремальных аномалий температуры воздуха  $\Delta T$  °С по суткам в январе (а) и июле (б)

рядок выше вероятности перехода температуры в диапазон около  $-7$  °С или вблизи  $+5$  °С (рис. 2, а). На 10-е сут вероятность “самосохранения” средней аномалии температуры понизилась до 0,0006, а крайние границы возможного, хотя и маловероятного (0,0001) перехода расширились от  $-8$  до  $+7$  °С. На 30-е сут вероятность наблюдения средне многолетней аномалии температуры составляла всего лишь 0,0004, тогда как диапазон возможного ее перехода расширился от  $-14$  до  $+10$  °С. Напротив, в июле, вероятность сохранения средней аномалии на 5-е сут была близкой 0,0017 при диапазоне возможных переходов от  $-3$  до  $+3$  °С (см. б на рис. 2). На 10-е сут вероятность “самосохранения” июльской средней аномалии понизилась до 0,0012, а на 30-е сут — до 0,0006 при диапазоне вероятных переходов от  $-8$  до  $+6$  °С. Следовательно, в январе “стохастическая память самосохранения” средней аномалии температуры воздуха в два раза ниже, чем в июле, ввиду более стремительного роста январской дисперсии.

“Стохастическая способность самосохранения” как январского минимума  $-25,55$  °С, так и июльского максимума  $+14,15$  °С оказалась похожей. Для январского минимума вероятность “самосохранения” составляла на первые сутки — 0,002, на пятые — 0,0009, на десятые — 0,0006, на тридцатые — 0,0004; для июльского максимума — на первые сутки — 0,0037, на пятые — 0,0017, на десятые — 0,0012, на тридцатые — 0,0007 (рис. 3). У январ-

ского минимума аномалий температуры, принятого нами в качестве предельного, переход возможен только в диапазоны более высоких температур (см. *а* на рис. 3). В связи с тем, что возможный экстремум положительных аномалий температуры воздуха  $+15,13\text{ }^{\circ}\text{C}$  еще не реализован, то переход от наблюдаемого максимума  $+14,15\text{ }^{\circ}\text{C}$  возможен как в диапазон более высоких температур, так и в диапазон более низких температур. При этом вероятность перехода в диапазон возможного температурного экстремума составляла на первые сутки — 0,0005, на пятые — 0,0011, на десятые — 0,001, на тридцатые — 0,0006. Диапазоны вероятных переходов январского минимума и июльского максимума хоть и зеркальные по форме, но существенно различаются по величине: на тридцатые сутки для минимума диапазон простирался от  $-25$  до  $-13\text{ }^{\circ}\text{C}$ , а для максимума от  $+15$  до  $+6\text{ }^{\circ}\text{C}$  (см. *б* на рис. 3), что согласуется с известной изменчивостью температурных аномалий воздуха в январе и относительной устойчивостью их в июле.

Таким образом, климатический процесс на протяжении прошедшего века был стабилен, что позволило моделирование его посредством решения уравнения Фоккера–Планка процесса Орнштейна–Уленбека; доминирующим при этом полагался процесс “винеровских блужданий”, которые удерживались в рамках естественных климатических изменений за счет механизмов процесса Орнштейна–Уленбека.

1. Гизман И. И., Скороход А. В. Теория случайных процессов. Т. 1. – Москва, Наука, 1971. – 664 с.
2. Степанов С. С. Стохастический мир. – <http://synset.com>.
3. Булашев С. В. Статистика для трейдеров. – Москва: Компания Спутник+, 2003. – 245 с.

Украинский гидрометеорологический институт  
ГСЧС Украины и НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 31.10.2013

**Л. А. Ковальчук**

### **Моделювання динаміки статистичних розподілів температури повітря за допомогою процесу Орнштейна–Уленбека та рівняння Фоккера–Планка**

*На основі аналізу щоденних аномалій температури повітря в Києві за минуле століття встановлено, що екстремальна додатна аномалія природним шляхом може досягнути  $+15,13\text{ }^{\circ}\text{C}$ , перевершивши на  $1^{\circ}$  спостережений максимум. Кліматичний процес був стабільний і не зазнавав антропогенних деформацій. Запропонована стохастична модель динаміки аномалій температури повітря, в основу котрої покладено “вінеровські блукання”, які утримувалися в природних кліматичних межах процесом Орнштейна–Уленбека.*

**L. A. Kovalchuk**

### **Dynamic simulation of statistical distributions of the air temperature by using the Ornstein–Uhlenbeck process and the Fokker–Planck equation**

*Based on the analysis of daily air temperature anomalies in Kiev during the last century, it is found that the extreme positive anomaly naturally can reach  $+15.13\text{ }^{\circ}\text{C}$ , exceeding the observed maximum by  $1^{\circ}$ . The climate process was stable and not subjected to human-induced deformations. We propose a stochastic model of the dynamics of air temperature anomalies, which is built on the “Wiener walks” held under natural climatic boundaries of the Ornstein–Uhlenbeck process.*

Б. Г. Пустовитенко, Е. А. Мержей

## К прогнозу ожидаемых сейсмических воздействий от сильных землетрясений Крыма

(Представлено академиком НАН Украины В. И. Старостенко)

*Описан новый подход к моделированию прогнозных сейсмических воздействий (акселерограмм) от сильных землетрясений Крыма с учетом региональных сеймотектонических условий. Разработанная методика основана на использовании статистических свойств динамических и кинематических параметров сейсмических волн и очагов совокупности местных землетрясений.*

Прогноз ожидаемых сильных сейсмических воздействий в виде временной функции ускорений колебания грунта (акселерограмм) является актуальной и практически значимой, но очень сложной задачей инженерной сейсмологии по обеспечению безопасности проживания в сейсмоактивных регионах.

Наиболее сейсмоактивным и сейсмоопасным в Украине является Крымский регион. Разрушительные и катастрофические землетрясения с интенсивностью в эпицентре  $I_0 = 9-10$  баллов и проявлением на поверхности с  $I_n = 8-9$  баллов возможны на всей территории Южного берега Крыма и Керченского полуострова с вероятностью непревышения расчетной интенсивности 90 и 95% при периоде повторяемости таких событий 1 раз в 500 и 1000 лет [1]. Прогнозная сейсмическая опасность отражена на картах общего сейсмического районирования ОСР-2004, которые являются основой строительных норм ДБН В.1.1-12 : 2006 Украины [2]. Данный нормативный документ регламентирует проектирование, строительство и реконструкцию зданий и сооружений в сейсмоопасных районах с учетом степени ответственности объектов. В частности, для нетиповых, особо ответственных и высотных зданий рекомендовано расчет нагрузок на сейсмическое воздействие выполнять прямым динамическим методом с использованием расчетных или реальных акселерограмм, инструментально зарегистрированных вблизи площадки строительства.

В Крыму, как по всей Украине, в последние годы все больше строится высотных нетиповых зданий (высота  $h \geq 50$  м), для проектирования и проверки корректности расчетных схем сейсмостойкости которых обязательно необходимо иметь записи сильных движений грунта, ожидаемые в основании зданий при прогнозных землетрясениях расчетной интенсивности.

Инструментально зарегистрированных записей сильных движений грунта от сильных землетрясений Крыма в настоящее время не имеется, так как за период инструментальных наблюдений с 1928 по 2013 гг. в Крымско-Черноморском регионе не происходило разрушительных землетрясений, а более слабые сейсмические колебания записываются приборами по смещениям. Акселерометры для записи ускорений в регионе отсутствуют.

В сложившейся ситуации для выполнения требований нормативных документов и обеспечения устойчивости строительных объектов единственно возможным остается моделирование прогнозных акселерограмм с учетом специфики местных сеймотектонических условий. При этом важно отметить, что главными параметрами сейсмических воздействий, влияющих на интенсивность сотрясений и разрушительный эффект, являются не только

уровень сейсмических колебаний, но и спектральный состав колебаний и их продолжительность.

Известно несколько методов и подходов к расчету синтезированных акселерограмм [3]: использование инструментальных записей сильных движений грунта; теоретическое моделирование и полуэмпирический метод; расчет по стандартным спектрам (методы синтеза расчетных акселерограмм и спектров действия). Эти методы по разным причинам оказались неприемлемыми для Крыма. Возможен также выбор акселерограмм из базы мировых данных по признаку подобия геолого-геофизических условий. Однако применение и этого метода представляется некорректной задачей в силу многообразия факторов, влияющих на колебательный процесс, и неоднозначности подбора аналогичных геолого-геофизических условий.

Нами предложен новый подход и методика моделирования ожидаемых сейсмических воздействий методом масштабирования записи с использованием статистических свойств совокупности слабых толчков, позволяющие максимально полно учесть особенности региональных сеймотектонических и очаговых условий Крыма, а также свойства глубинной среды на пути очаг — станция регистрации.

Основные сейсмогенерирующие структуры, способные накапливать и сбрасывать напряжения в виде сильных землетрясений с максимальными магнитудами  $M_{\max}$  от 6,5 до 7,5, расположены в Черном море вблизи береговой зоны Крыма на расстояниях 20–40 км от крупных населенных пунктов и курортных комплексов, где в настоящее время интенсивно ведется строительство высотных и ответственных зданий (рис. 1) [4].

Очаги землетрясений расположены в земной коре на глубинах  $h = 10\text{--}50$  км с преобладанием их числа на  $h = (20 \pm 5)$  км [1]. Тип подвижек в очагах: взбросы, сбросы, сбросо(взбросо)-сдвиги [5].

Запись сейсмических колебаний от местных землетрясений Крыма осуществляется системой региональных сеймостанций, расположенных в городах: Севастополь, Алушта, Ялта, Судак, Феодосия, Симферополь, Керчь (см. рис. 1). За период высокочувствительных инструментальных наблюдений (1955–2012 гг.) получены и обработаны более 3000 местных землетрясений, произошедших во всех сейсмогенерирующих структурах в широком диапазоне магнитуд  $M_w$  от 0,1 до 5,8 или энергетических классов по региональной шкале [6] соответственно  $K_{\Pi} = 5\text{--}14$ , с эпицентрными расстояниями от станций регистрации 5–350 км.

Результаты многолетних инструментальных исследований в Крыму показывают, что параметры и закономерности колебаний грунта при землетрясениях сильно отличаются друг от друга в зависимости от их интенсивности, эпицентрального расстояния, глубины очага, места их возникновения и станции регистрации. К настоящему времени в Крыму имеется представительная база данных о статистических свойствах, особенностях волновых форм и спектрального состава колебаний от местных землетрясений на каждой из региональных сеймостанций. Благодаря обширной базе данных по слабым землетрясениям можно использовать два варианта решения задачи по моделированию акселерограмм: первый — это работа с индивидуальными “типичными” (характерными) записями, второй — статистический подход, требующий большого количества оцифрованных записей для последующих статистических оценок.

Нами выбран первый вариант с использованием установленных статистических свойств динамических параметров сейсмических волн и очагов местных землетрясений и закона подобия [7] между спектральными характеристиками слабых и сильных событий Крыма [8]. Как известно, закон подобия — это очень сильное сглаживание чрезвычайно разнообраз-

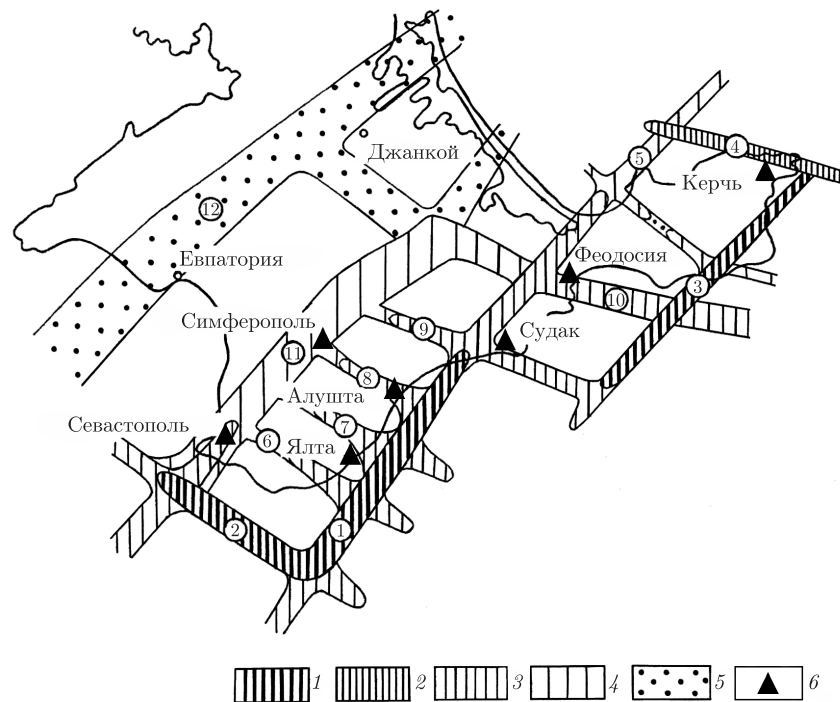


Рис. 1. Карта-схема сейсмогенерирующих структур Крымско-Черноморского региона [4]. 1 —  $M_{\max} = 7$ ; 2 —  $M_{\max} = 6,5$ ; 3 —  $M_{\max} = 6$ ; 4 —  $M_{\max} = 5$ ; 5 —  $M_{\max} = 4$ ; 6 — сейсмические станции.

Цифры в кружках соответствуют нумерации сейсмогенерирующих структур: 1 — Южнобережная; 2 — Одесско-Синопская; 3 — Правдинская; 4 — Темрюкская; 5 — Южно-Азовская; 6 — Чернореченская; 7 — Ялтинская; 8 — Альминская; 9 — Молбайская; 10 — Крымско-Кавказская; 11 — Крымская; 12 — Донузлавская

ных индивидуальностей, потому важно выбрать преобладающую для региональных условий модель волновых форм и спектров сейсмических волн. При этом предполагается, что в пределах одной и той же сейсмогенной зоны (структуры) условия возникновения очагов землетрясений являются стационарными, т.е. соблюдается однотипность степени раздробленности среды, формирующая высокочастотную часть спектра, близость механизмов и размеров очагов одного ранга магнитуд. Отсюда следует общая методология и методика моделирования акселерограмм для крымских условий, которая заключается в следующем.

Свойства и характер сейсмических колебаний на станции регистрации обусловлены и предопределены в основном физическими процессами в очаге землетрясения, физико-механическими свойствами глубинной среды в очаговой зоне и на пути распространения сейсмических волн, направленностью излучения «очаг — станция», глубиной очага, инженерно-геологическими условиями под станцией (амплитудно-частотной характеристикой грунтовых условий), частотным диапазоном регистрирующего прибора. Следуя установленному закону подобия для очагов землетрясений Крыма [8], можно полагать, что сейсмические колебания на региональных сейсмических станциях от будущего сильного землетрясения, ожидаемого в данной сейсмогенной структуре, сохраняют в себе основные свойства совокупности более слабых сейсмических толчков, как в спектральной, так и во временной областях.



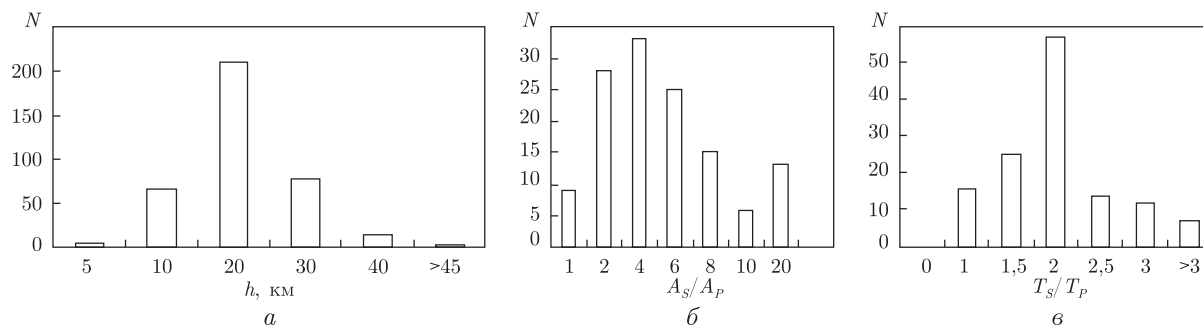


Рис. 2. Статистические закономерности распределения: *a* — глубин очагов в центральной зоне региона (Южнобережная зона); *б, в* — отношений амплитуд и периодов объемных сейсмических волн соответственно по станции “Симферополь”

В связи с этим **первым** (главным) этапом в нашем подходе является выбор наиболее типичных землетрясений с типичной записью, которая бы отвечала всем основным установленным статистическим свойствам совокупности изученных очагов.

Итак, основные критерии выбора типичного землетрясения и соответственно типичной записи:

1. Очаг землетрясения должен быть приурочен к основной сейсмогенерирующей структуре, ближайшей к объекту строительства и станции регистрации. Так, при проектировании объектов в городах Ялта и Алушта необходимо подбирать исходные (типичные) землетрясения, произошедшие в основной Южнобережной зоне и сопряженных с ней поперечных структур на эпицентральных расстояниях 10–40 км от сейсмических станций “Ялта” и “Алушта”, для г. Севастополь — в структуре Одесско-Синопского и Чернореченского разломов, а для г. Судак — в зоне Молбайского разлома и т. д. (см. рис. 1). Из рисунка видно, что вблизи крупных городов и курортных комплексов Крыма имеются сейсмогенерирующие структуры с высоким энергетическим потенциалом, а в самих городах расположены сейсмические станции для регистрации сейсмических колебаний от землетрясений.

2. Глубина очага землетрясения находится в диапазоне преобладающих глубин для данной геологической структуры. Пример для Южнобережной зоны дан на рис. 2, *a*.

3. Динамические параметры продольных (*P*) и поперечных (*S*) волн и отношения амплитуд  $A_S/A_P$  и периодов  $T_S/T_P$  на ближайшей к объекту станции регистрации соответствуют преобладающим долговременным значениям в функции их распределения. Например, на станции “Симферополь” для большинства землетрясений отношение амплитуд  $A_S/A_P$  находится в интервале от 2 до 6 при максимуме  $A_S/A_P = 4$ , а  $T_S/T_P = 2$  (см. *б, в* на рис. 2).

4. Периоды  $T_P$  и  $T_S$ , относительная длительность максимальных сейсмических колебаний  $\tau_{1/3}$ , общая длительность записи землетрясения  $D$  на сейсмической станции отвечают полученным по экспериментальным данным долговременных зависимостей этих параметров от энергетического класса ( $K_{II}$ ) или магнитуды ( $M_w$ ):  $T_P(K_{II})$ ,  $T_S(K_{II})$ ,  $\tau_{1/3}(K_{II})$ ,  $D(K_{II})$  и попадают в интервал среднеквадратичных отклонений относительно линии их аппроксимации. Примеры экспериментальных зависимостей  $D(K_{II})$  по станциям “Алушта” (1) и “Севастополь” (2), (3), рассчитанные по совокупности более 300 станционных замеров:

$$\lg D = (0,230 \pm 0,005)K_{II} - (0,25 \pm 0,03), \quad \rho > 0,95, \quad (1)$$

$$\lg D = (0,195 \pm 0,005)K_{II} - (0,095 \pm 0,030), \quad \rho > 0,95, \quad (2)$$

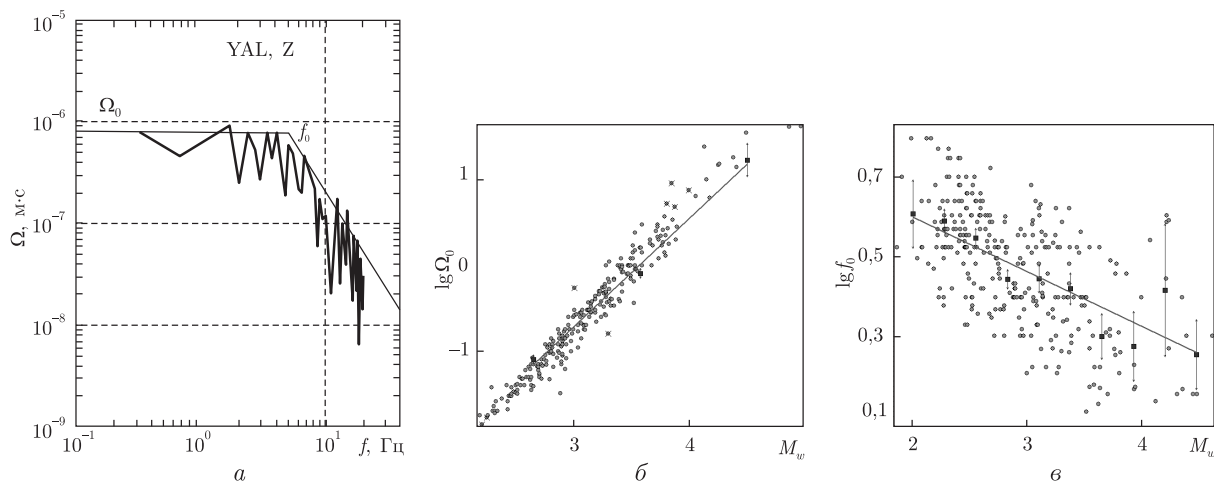


Рис. 3. Амплитудный спектр записи продольной волны  $P$  землетрясения 9 сентября 2011 г. с  $K_{\Pi} = 9,7$ ,  $h = 20$  км (сейсмостанция “Ялта”, эпицентрального расстояния 18 км) (а) и зависимости параметров амплитудного спектра: спектральной плотности  $\Omega_0$  (б) угловой частоты  $f_0$  (в) от магнитуды землетрясения  $M_w$

$$\lg \tau_{1/3} = (0,14 \pm 0,02)K_{\Pi} - (0,41 \pm 0,16), \quad \rho > 0,95. \quad (3)$$

5. Форма спада амплитуд колебаний со временем  $A(t)$  и изменения периодов вдоль записи  $T(t)$  не противоречат сводным огибающим и уравнениям регрессии для записей совокупности землетрясений по каждой станции отдельно. Приведем пример эмпирического уравнения для станции “Ялта”, полученного методом ортогональной регрессии с использованием 93 пары значений:

$$\lg T = (0,45 \pm 0,03) \lg t - (0,98 \pm 0,04), \quad \rho > 0,95.$$

6. Спектральный состав объемных  $P$ - и  $S$ -волн от типичного землетрясения подчиняется следующим требованиям: энергетический спектр имеет один ярко выраженный максимум [9]; амплитудный спектр истинного колебания соответствует дислокационной модели Бруна ( $\omega^{-2}$ ) — с одной угловой частотой  $f_0$  и резким спадом в высокочастотной части спектральной плотности  $\Omega_0(f)$  при  $f > f_0$  по квадратичному закону [10] (рис. 3, а).

7. Спектральная плотность  $\Omega_0$  в длиннопериодной части амплитудного спектра и угловая частота  $f_0$  попадают в интервал среднеквадратичных отклонений относительно линии аппроксимации их долговременных корреляционных зависимостей от энергетического уровня землетрясений:  $\Omega_0(K_{\Pi}, M_w)$  и  $f_0(K_{\Pi}, M_w)$  для каждой станции регистрации (см. б, в на рис. 3).

Выбранные по перечисленным критериям записи типичных землетрясений из главной и ближайшей к объекту сопряженной структуры далее с помощью долговременных зависимостей спектральных, динамических и кинематических параметров сейсмических колебаний от энергии землетрясения:  $\Omega_0(M_w)$  и  $f_0(M_w)$  трансформируются в область прогнозного землетрясения с расчетными значениями интенсивности  $I_r$  и пикового ускорения  $A$ .

Рассмотрим последовательные этапы моделирования синтетической акселерограммы на примере реальной площадки в г. Ялта:

1) в качестве одной из типичных выбрана цифровая запись землетрясения с  $M_w = 3,4$ , произошедшего 7 февраля 2006 г. в 22 ч 58 мин 38,1 с в Южнобережной сейсмогенной зоне

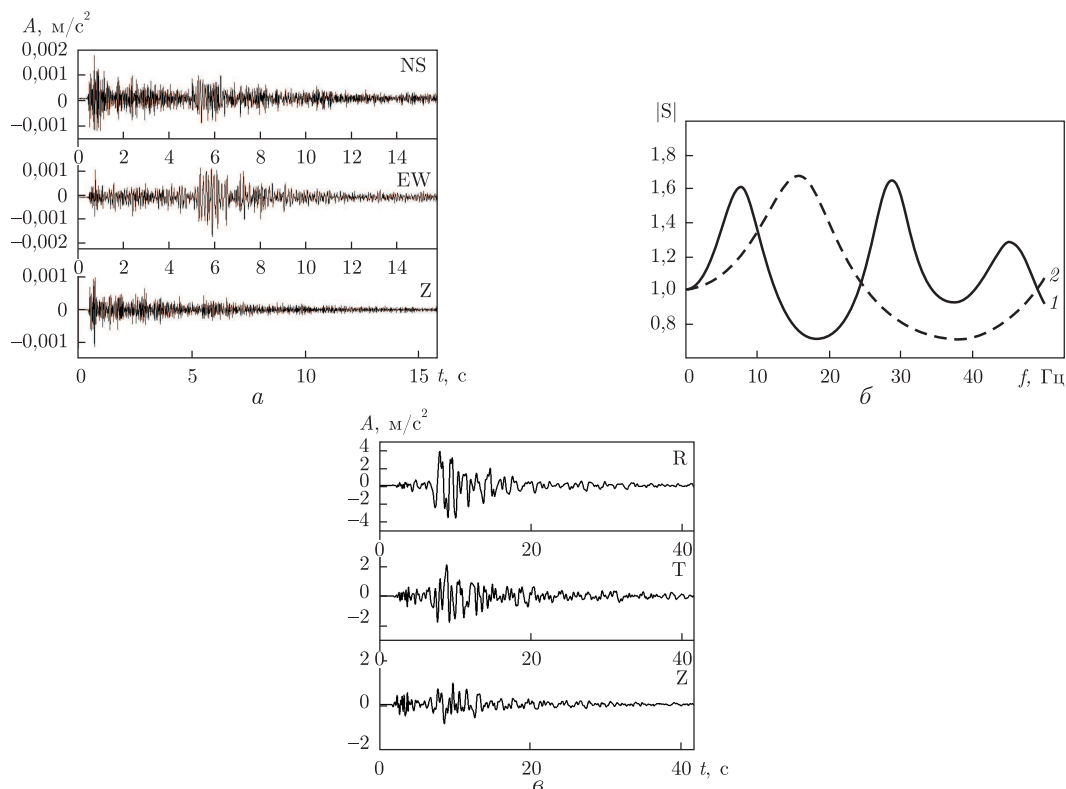


Рис. 4. Акселерограмма типичного землетрясения 7 февраля 2006 г., зарегистрированного на сейсмической станции “Ялта” (а); амплитудно-частотные характеристики среды на исследуемой площадке для объемных  $P$ - и  $SH$ -волн соответственно кривые 2 и 1 (б); акселерограмма прогнозируемых сейсмических колебаний грунта на исследуемой площадке для расчетной интенсивности воздействий  $I_r = 8,36$  балла (в)

на глубине 13 км. Расстояние до сейсмической станции “Ялта” и исследуемой площадки соответственно составляет 13 и 14 км. Динамические и кинематические параметры выбранной сейсмической записи соответствуют перечисленным выше критериям;

2) путем численного дифференцирования типичная запись, приведенная к истинному колебанию грунта, преобразована в акселерограмму по компонентам NS, EW и Z (а на рис. 4). Далее, в соответствии с требованиями расчета сейсмических воздействий на объекты строительства [2, 11, 12], полученная акселерограмма перепроектирована в горизонтальной плоскости по направлениям: очаг — объект (радиальная составляющая  $R$ ) и перпендикулярная ей тангенциальная составляющая  $T$ ;

3) с помощью быстрого преобразования Фурье рассчитан комплексный спектр ускорений, из которого исключено влияние передаточной характеристики верхних слоев грунта под сейсмической станцией “Ялта”;

4) используя зависимости для станции “Ялта” вида  $\lg A = a + bM_w$ , где  $A$  — динамический параметр ( $\Omega_0$  и  $f_0$ ),  $a$ ,  $b$  — постоянные коэффициенты, спектр трансформирован на магнитуду  $M_w$ , при которой сейсмические воздействия на площадке соответствуют расчетной интенсивности  $I_r$ , которая определяется по результатам специальных сейсмологических исследований;

5) по результатам инженерно-геологических изысканий и работ по сейсмическому микрорайонированию определено строение грунта под исследуемой площадкой [13], положен-

ное в основу расчета амплитудно-частотной характеристики среды (см. б на рис. 4) по алгоритму Ратниковой [14]. В итоге стационарный масштабированный спектр ускорений откорректирован с учетом передаточной характеристики среды под площадкой;

б) обратным преобразованием Фурье получена искомая синтетическая акселерограмма расчетного сейсмического воздействия ( $\text{м/с}^2$ ) (нормированная на пиковое ускорение  $A$ , соответствующее расчетной интенсивности  $I_r$ ) на исследуемой площадке строительства (см. в на рис. 4). Полученная акселерограмма для контроля правильности расчетов проверяется на соответствие эмпирическим зависимостям, свойственным типичным землетрясениям.

Описанный выше алгоритм моделирования ожидаемых прогнозных сейсмических воздействий от сильных землетрясений Крыма на основе статистических свойств спектральных и динамических параметров сейсмических колебаний совокупности более слабых сейсмических толчков реализован в специальном программном комплексе расчета акселерограмм для практического их использования при проектировании высотных и ответственных объектов строительства в Крыму [15].

1. Пустовитенко Б. Г., Кульчицкий В. Е., Борисенко Л. С., Поречнова Е. И. Общее сейсмическое районирование территории Крыма (ОСР-98) // Геофиз. журн. – 1999. – № 6. – С. 3–15.
2. Будівництво в сейсмічних районах України. ДБН В.1.1–12:2006. – Київ: Мінбуд України, 2006.
3. Штейнберг В. В., Сакс М. В., Антикаев Ф. Ф. Методы оценки сейсмических воздействий (пособие) // Задание сейсмических воздействий. Вопросы инженерной сейсмологии. Вып. 34. – Москва: Наука, 1993. – С. 5–94.
4. Борисенко Л. С., Пустовитенко Б. Г., Вольфман Ю. М., Дублянский В. Н., Новик Н. Н. Некоторые методические аспекты сейсмического районирования областей новейшего горообразования и сопредельных территорий (на примере Крыма) // Сейсмичность и сейсмическое районирование Северной Евразии. – Москва: Б. и., 1995. – Вып. 2./3. – С. 27–45.
5. Пустовитенко А. А. Типы подвижек в очагах Черноморских землетрясений // Моніторинг небезпечних геологічних процесів та екологічного стану середовища: Матеріали 6 Міжнарод. науч. конф., Київ, 2005. – С. 121–123.
6. Пустовитенко Б. Г., Кульчицкий В. Е. Об энергетической оценке землетрясений Крымско-Черноморского региона // Магнитуда и энергетическая классификация землетрясений. Т. 2. – Москва, 1974. – С. 113–125.
7. Aki K. Scaling law of seismic spectrum // J. Geophys. Res. – 1967. – 72, No 4. – P. 1217–1231.
8. Пустовитенко Б. Г. О подобии очагов слабых и сильных землетрясений Крыма // Сучасні небезпечні процеси. Вплив на довкілля. Нові технології прогнозування та захисту: Матеріали 2 наук.-техн. конф. – НПП “Екологія. Наука. Техніка”. – Київ, 2004. – С. 59–61.
9. Пустовитенко Б. Г., Пантелеева Т. А. Спектральные и очаговые параметры землетрясений Крыма. – Киев: Наук. думка, 1990. – 251 с.
10. Brune J. N. Tectonic stress and the spectra of seismic shear waves from earthquakes // J. Geophys. Res. – 1970. – 75, No 20. – P. 4997–5009.
11. Исичко Е. С. Методика расчета акселерограмм для конкретной строительной площадки // Bul. Inst. Seismologie al ASM. – 2007. – № 1. – P. 58–67.
12. Хачилян Э. Прикладная сейсмология. – Изд. ГИТУТЮН. НАН Республики Армения, 2008. – 491 с.
13. Федин М. М., Скляр А. М. Отчет “Сейсмическое микрорайонирование территории реконструкции зданий и сооружений танцевальной площадки “Дружба” в рекреационный комплекс по адресу: АРК, г. Ялта, парк Гагарина, 9” – фонды ООО “Южнобережный центр изысканий”. – Алушта, 2013.
14. Ратникова Л. И. Методы расчета сейсмических волн в тонкослоистых средах. – Москва: Наука, 1973. – 124 с.
15. Пустовитенко Б. Г., Кульчицкий В. Е., Калинюк И. В., Мерзсей Е. А. Сравнительные характеристики акселерограмм, смоделированных для разных сеймотектонических условий // Сейсмостойк. стр-во. Безопасность сооружений. – 2012. – № 6. – С. 20–23.

Отдел сейсмологии Института геофизики  
им. С. И. Субботина НАН Украины, Симферополь

Поступило в редакцию 28.10.2013

**Б. Г. Пустовітенко, Є. О. Мержей**

**До прогнозу очікуваних сейсмічних дій від сильних землетрусів Криму**

*Описано новий підхід до моделювання прогнозних сейсмічних впливів (акселерограм) від сильних землетрусів Криму з урахуванням регіональних сейсмотектонічних умов. Розроблена методика заснована на використанні статистичних властивостей динамічних і кінематичних параметрів сейсмічних хвиль і вогнищ сукупності місцевих землетрусів.*

**B. G. Pustovitenko, E. A. Merjey**

**On the prediction of expected seismic impacts from strong earthquakes of the Crimea**

*A new approach to the modeling of predictive seismic effects (accelerograms) of strong earthquakes of the Crimea with accounting for the regional seismotectonic conditions is described. The developed technique is based on the statistical properties of the dynamic and kinematic parameters of seismic waves and seismic sources of the aggregate of local earthquakes.*

Н. Н. Шаталов

## Крупная Новоигнатъевская дайка андезитовых порфиритов — как индикатор разломно-блоковой тектоники и глубинного строения зоны сочленения Донбасса с Приазовьем

(Представлено академиком НАН Украины Н. П. Щербаком)

*Приведены результаты изучения сравнительно крупной дайки андезитовых порфиритов и ее роли как индикатора разломно-блоковой тектоники и глубинного строения зоны сочленения Донбасса с Приазовьем. Определены закономерности структурно-геологической позиции Новоигнатъевской дайки и ее приуроченности к узлу пересечения разломов ортогональной и диагональной систем. Проанализированы возможные глубины формирования андезитовых магм.*

Район исследований охватывает южные окраины Донбасса и зону сочленения его с Приазовским мегаблоком Украинского щита (УЩ). В геологическом строении региона выделяются три структурных этажа. Нижний (докембрийский) структурный этаж представлен древними архей-протерозойскими кристаллическими породами, средний (герцинский) — палеозойскими осадочными, осадочно-вулканогенными и интрузивными породами и верхний (альпийский) — мезокайнозойскими осадочными отложениями платформенного чехла [1–15].

Сравнительно крупная Новоигнатъевская дайка пироксен-роговообманковых андезитовых порфиритов геолого-геофизическими методами и буровыми скважинами закартирована вблизи устьевой части балки Хайна-Чохрах, по левому склону р. Мокрая Волноваха, в 5,5 км восточнее с. Новоигнатъевка. Азимут простирания дайки СЗ 290°, азимут падения СВ 20°, угол падения 75°. Мощность дайки варьирует от 300 до 600 м. По простиранию дайка прослежена на расстоянии не менее 3 км. Обнажение дайки наблюдается лишь в пределах левого склона р. Мокрая Волноваха. Вмещающими породами являются осадочно-вулканогенные образования долгинской и раздольненской свит верхнего девона. Некоторые разновидности (туфопесчаники, песчаники, конгломераты и др.) пород указанных свит вскрыты скважинами 1, 5, 12, 18, 25 в экзоконтактах дайки. Для них характерна темно-бурая окраска, мелко-, среднезернистое строение, шероховатость. В обломочной части преобладают зерна кварцевого состава, пирокластический материал присутствует в незначительном количестве. Он представлен обломками различных пород и лимонитизированного вулканического стекла, сцементированными кремнисто-карбонатными образованиями. Дайка представляет значительный интерес в качестве месторождения строительных материалов.

Новоигнатъевскую дайку следует рассматривать в составе пород андезит-трахиандезитового комплекса Донбасса, где выделены андезитобазальты, андезиты, андезитовые порфириты, андезитодациты, дациты, трахиандезиты, трахидациты и кварцевые латиты. Все разнообразие закартированных в зоне сочленения Донбасса с Приазовьем и в прибортовой части Приазовского мегаблока пород андезит-трахиандезитового комплекса обусловлено вариациями главных породообразующих минералов, а именно — пироксена, роговой обманки, плагиоклаза, калиевого полевого шпата и кварца.

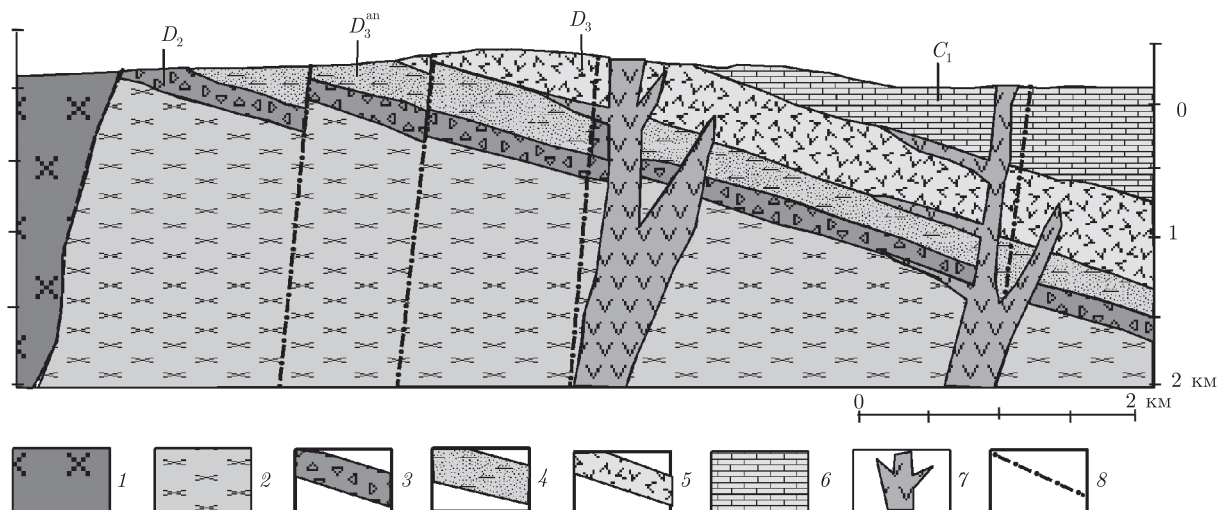


Рис. 1. Схематический геологический разрез района внедрения Новоигнатъевской дайки андезитовых порфиритов:

1 — граниты амфиболовые и амфибол-пироксеновые (дубовские); 2 — граносиениты восточноприазовского комплекса; 3 — песчаники, сланцы николаевской свиты ( $D_2$ ); 4 — вулканогенные щелочно-базальтоидные породы (базальты, авгититы и др.) антон-тарамской свиты ( $D_3^{an}$ ); 5 — нерасчлененные образования долгинской (песчаники, конгломераты, алевролиты, аргиллиты) и раздольненской (песчаники, алевролиты, туфы кремнистые) свит ( $D_3$ ); 6 — известняки и доломиты турнейского и визейского ярусов каменноугольной системы ( $C_1$ ); 7 — малые интрузии и дайки андезит-трахиандезитового комплекса; 8 — разломы

Как демонстрируют рис. 1 и 2, Новоигнатъевская дайка приурочена к узлу пересечения различно ориентированных разрывных нарушений ортогональной и диагональной систем, создающих здесь микроблоковую структуру. Контакты с вмещающими ее осадочно-вулканогенными породами долгинской и раздольненской свит верхнего девона тектонические. Субмеридиональными и северо-восточными системами разрывных нарушений обусловлено ее северо-западное выклинивание. Дайка прорывает породы докембрийского кристаллического фундамента и полого наклоненные в северном направлении (до  $20^\circ$ ) осадочно-вулканогенные образования среднего и верхнего девона, а перекрывается маломощными осадками антропогена. Время внедрения пород андезит-трахиандезитового комплекса определяется довольно точно исходя из совокупности геолого-структурных и изотопных данных. Они прорывают древние породы докембрия, а также девона и карбона. На левобережье р. Дон они секут отложения верхнего карбона, а их многочисленные обломки встречены в песчаниках верхнего триаса. Имеющиеся определения изотопного возраста пород комплекса укладываются в интервал времени 200–230 млн лет. На основании этих данных образование пород комплекса связывают с пфальцской фазой герцинского орогенеза, проявившейся в Донбассе на границе перми и триаса [2–4, 10].

Структурно Новоигнатъевская дайка приурочена к зоне сочленения Донбасса с Приазовским мегаблоком УЩ [1–15]. Данную зону исследователи нередко рассматривают как Южно-Донецкий микроавлакоген субширотного простирания шириной 20–30 и длиной 90–100 км или как Южно-Донбасскую зону разломов, представляющую собой крупный тектонический шов, разделяющий Донецкий глубинный прогиб (являющийся юго-восточной частью Днепровско-Донецкого авлакогена или рифт-синеклизы) и Приазовский мегаблок УЩ. В тектоническом отношении описываемая зона с юга и севера ограничена глубин-

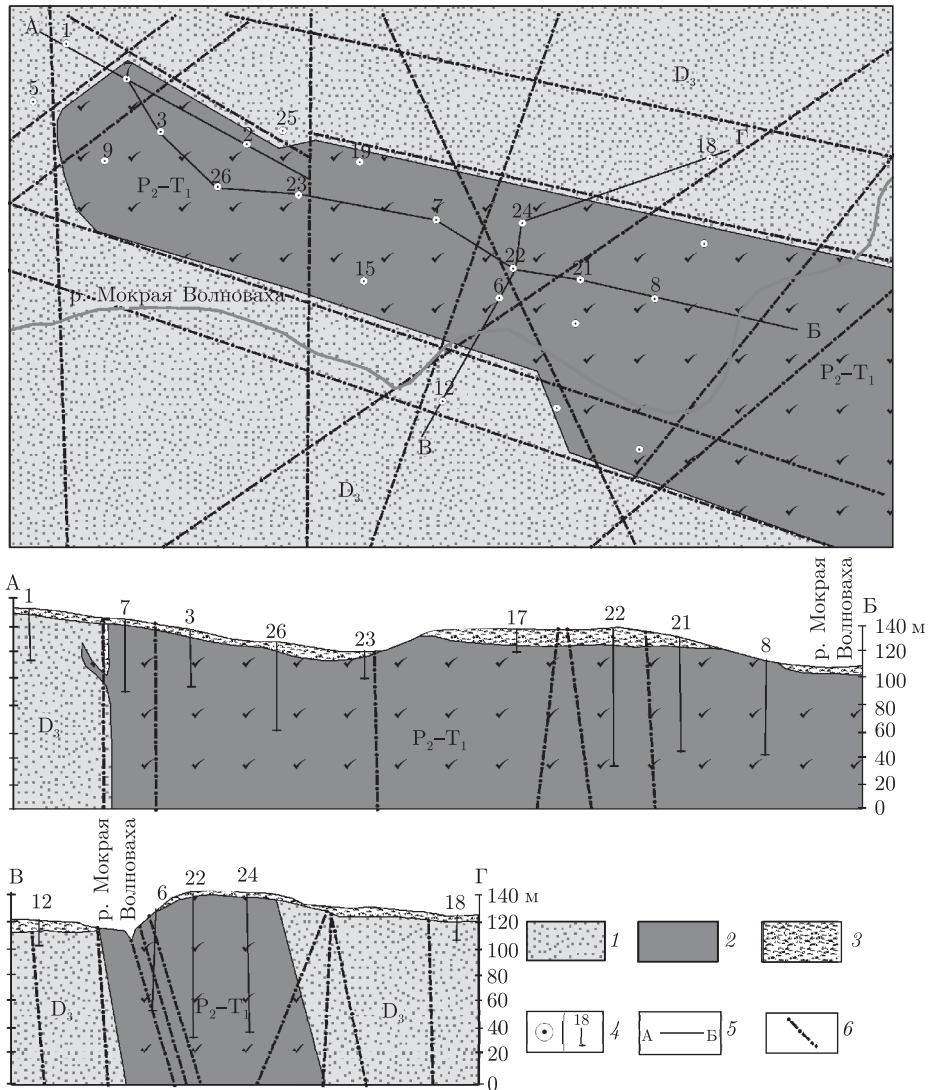


Рис. 2. Схематический план и геологические разрезы (по линии А–Б и В–Г) Новоигнатевской дайки андезитовых порфиритов:

1 — нерасчлененные образования долгинской (песчаники, конгломераты, алевролиты, аргиллиты) и раздольненской (песчаники, алевролиты, туфы кремнистые) свит ( $D_3$ ); 2 — дайка андезитовых порфиритов; 3 — осадочные породы антропогена; 4 — скважины и их номера; 5 — геологические разрезы по линиям А–Б и В–Г; 6 — разломы

ными разломами по которым наблюдаются резкие опускания (сбросы, сбросо-свиги) пород докембрийского кристаллического фундамента и фанерозойских осадочно-вулканогенных образований. Сформированная таким образом зона сочленения Донбасса с Приазовьем (микроавлаоген) характеризуется резкими изменениями фациального состава и мощности осадочно-вулканогенных образований, сложной разломно-блоковой и сдвиговой тектоникой, интенсивным магматизмом. Амплитуды отдельных сбросов здесь достигают 1–2 км, а продольных и поперечных сдвигов — 4–5 км.

Заложение горстово-грабеновых структур зоны сочленения Донбасса с Приазовским мегаблоком УЩ произошло в раннефранское время в связи с тектоническими движениями ин-



тенсивно проявившимися после формирования осадочных пород николаевской свиты (средний девон). В течение девона — антропогена литосфера описываемого региона претерпела сложное тектоническое развитие. Основная роль в заложении и развитии Южно-Донецкого микроавлакогена принадлежала эндогенным тектоническим процессам, преимущественно пульсационным движениям астеносферного диапира — мощного генератора тепла, энергии, подвижной магмы, флюидов и рудоносных гидротермально-метасоматических растворов.

Территория Южно-Донецкого грабена, где закартирована Новоигнатьевская дайка андезитовых порфиритов, разломами расчленяется на ряд более мелких блоков — Камышевахский, Богдановский, Николаевский, Новотроицкий, Ольгинский. Новоигнатьевская дайка пространственно и структурно тяготеет к узлу пересечения Горняцкого и Хайна-Чокракского глубинных разломов, испытавших сбросо-сдвиговый характер движений и многократную тектономагматическую активизацию. По Хайна-Чокракскому сбросу субширотного простирания, в частности, произошло погружение докембрийских и девонских осадочно-вулканогенных пород в северном направлении. Горняцкий сбросо-сдвиг субмеридионального простирания с запада ограничивает распространение андезитовых порфиритов Новоигнатьевской дайки. По Горняцкому разлому произошли вертикальные и горизонтальные смещения пород докембрийского фундамента и осадочно-вулканогенных образований девона и карбона.

В андезитовых порфиритах Новоигнатьевской дайки, как и во вмещающих их осадочных породах, наиболее развиты системы трещин с азимутами простирания:  $270^\circ$ ,  $290\text{--}300^\circ$ ,  $330\text{--}335^\circ$ ,  $355\text{--}360^\circ$ ,  $20^\circ$ ,  $40^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $75^\circ$ . Серии субвертикальных, субгоризонтальных и наклонных трещин секут породы дайки образуя мелкие столбчатые (блочные) отдельности. Вдоль основной системы трещиноватости ( $355\text{--}360^\circ$ ) развиты удлиненные зерна роговой обманки и кальцит. Системы контракционных и тектонических трещин других ориентировок нередко минерализованы кальцитом, сульфидами железа, меди, свинца и цинка. Кроме того, по трещинам в дайке развиты радиоактивные минералы, о чем свидетельствуют геохимические данные и результаты замеров радиоактивности прибором СРП по скв. 24. Системы субгоризонтальных и наклонных (под углом  $40\text{--}70^\circ$ ) трещин в породах дайки менее распространены нежели субвертикальные. Важно отметить, что породы андезит-трахиандезитового комплекса, закартированные в зоне сочленения Донбасса с Приазовьем и в северных прибортовых частях Приазовского мегаблока УЩ, также расчленены многочисленными субвертикальными, субгоризонтальными и наклонными трещинами. Полевые исследования штоков, даек, лакколитообразных тел андезит-трахиандезитового комплекса, развитых в устье балки Камышеваха, по рекам Сухая Волноваха, Мокрая Волноваха и в карьере у с. Новотроицкое свидетельствуют о том, что характер их трещиноватости весьма однотипен. Здесь повсеместно развиты серии субвертикальных, субгоризонтальных и наклонных тектонических и контракционных трещин, расчленяющих породы комплекса на столбчатые (блочные) отдельности. При этом субвертикальные системы трещин довольно часто совпадают с системами трещин отдельности осадочных пород Донбасса и Приазовского мегаблока.

Приведенные материалы убедительно свидетельствуют о том, что в результате тектономагматической активизации систем глубинных разломов диагональной и ортогональной ориентировки в пределах Южно-Донецкого микроавлакогена в предтриасовое время возник глубинный раскол земной коры северо-западной ( $SZ\ 290^\circ$ ) ориентировки залеченный в кратчайшее время магмой среднего состава. Структурно-геологические и петрологические данные позволяют считать, что магма, сформировавшая Новоигнатьевскую дайку андези-

товых порфиритов, возникла на глубине не менее 100–140 км. В работе [5] экспериментально доказано возможность образования андезитовой магмы именно на этих глубинах. На глубинность разломов указывают также широкое развитие здесь ассоциаций интрузивных пород щелочно-ультраосновной, щелочно-базальтоидной и других формаций. Благоприятные тектонические условия (растяжение земной коры, латеральные и вертикальные движения геоблоков) способствовали быстрому внедрению андезитовой магмы сквозь толщу докембрийских пород фундамента и осадочно-вулканогенных пород палеозоя. Следовательно, сравнительно крупную Новоигнатьевскую дайку андезитовых порфиритов несомненно следует рассматривать как индикатор разломно-блоковой тектоники и глубинного строения зоны сочленения Донбасса с Приазовьем.

1. Бондарчук В. Г. Тектоника Большого Донбасса и происхождение ровообразных прогибов в платформе // Геол. журн. – 1966. – № 2. – С. 3–11.
2. Бутурлинов Н. В., Соколова Г. У. Возраст андезитов Донецкого бассейна // ДАН СССР. – 1964. – 159, № 1. – С. 95–97.
3. Бутурлинов Н. В., Скаржинский В. И. О комплексах магматических пород и магматических формациях Донецкого бассейна // Там же. – 1970. – 193, № 2. – С. 401–404.
4. Бутурлинов Н. В., Зарицкий А. И., Глебова М. С. Андезит-трахиандезитовый комплекс Донбасса и особенности его формирования // Геол. журн. – 1972. – № 6. – С. 89–94.
5. Грин Д. Х., Рингвуд А. Э. Происхождение базальтовых магм // Петрология верхней мантии. – Москва: Мир, 1968. – С. 132–229.
6. Лебедев Т. С., Собакарь Г. Т. Тектоника северо-восточного Приазовья по данным геофизических исследований // Докл. АН УССР. – 1961. – № 10. – С. 564–567.
7. Майданович И. А. О глубинной тектонике Донбасса // Докл. АН УРСР. – 1968. – № 6. – С. 506–509.
8. Майданович И. А., Дубровский Б. И. Глубинные разломы и современные вертикальные движения земной коры в Западном Донбассе // Докл. АН УССР. Сер. Б. – 1970. – № 4. – С. 73–76.
9. Михалев А. К. К вопросу о природе поперечных сбросов в срединных районах Донецкого бассейна // Геотектоника. – 1971. – № 2. – С. 79–83.
10. Скопиченко И. М., Бутурлинов Н. В. Андезит-трахиандезитовый комплекс зоны сочленения Донбасса с Приазовьем. Петрология и эволюция // Геол. журн. – 1987. – № 1. – С. 97–105.
11. Собакарь Г. Т. Структура зоны сочленения Донбасса с Приазовским массивом // Там же. – 1961. – № 3. – С. 60–64.
12. Чебаненко И. И. О ровообразных прогибах платформ // Докл. АН УССР. – 1961. – № 4. – С. 520–522.
13. Чекунов А. В. К геодинамике Днепровско-Донецкой рифт-синеклизы // Геофиз. журн. – 1994. – № 3. – С. 3–9.
14. Шаталов Н. Н. Дайки Приазовья. – Киев: Наук. думка, 1986. – 192 с.
15. Шатский Н. С. Большой Донбасс и система Вичита. Ст. 2 // Изв. АН СССР. Сер. геол. – 1946. – № 6. – С. 57–90.

*Институт геологических наук НАН Украины, Киев*

*Поступило в редакцию 12.09.2013*

**М. М. Шаталов**

### **Крупна Новогнатівська дайка андезитових порфіритів — як індикатор розломно-блокової тектоніки та глибинної будови зони зчленування Донбаса з Приазов'ям**

*Наведені результати дослідження відносно крупної дайки андезитових порфіритів та її ролі як індикатора розломно-блокової тектоніки і глибинної будови зони зчленування Донбаса з Приазов'ям. Визначені закономірності структурно-геологічної позиції Новогнатівської дайки та її приуроченість до вузла перетину розломів ортогональної та діагональної систем. Проаналізовані можливі глибини формування андезитових магм.*

N. N. Shatalov

**The large Novoignatievien dyke of andesite porphyrites as an indicator for the fault-block tectonics and the deep structure for the Donbas and Near-Azovian junction zone**

*The large dyke of andesite porphyrites as an indicator of the fault-block tectonics and the deep structure of the Donbas and Near-Azovian junction zone has been studied. The structural geological position of the Novoignatievien dyke, its features, and the conformity with the fault intersection node for the orthogonal and diagonal systems are defined. The possible depths of andesite magma formation are considered.*



УДК 546.87:881

К. Л. Бичков, К. В. Тереміленко,  
член-кореспондент НАН України М. С. Слободяник

### Кристалотворення $\text{BiVO}_4$ з розплавів системи $\text{K}-\text{Bi}-\text{V}-\text{Mo}-\text{O}$

*Оптимізовано умови синтезу  $\text{BiVO}_4$  у процесі кристалізації з розплавів системи  $\text{K}-\text{Bi}-\text{V}-\text{Mo}-\text{O}$  при співвідношеннях вихідних компонентів  $\text{V}/\text{Mo} = 0,50-6,00$  і  $\text{K}/(\text{V} + \text{Mo}) = 0,55-2,00$  при мольному вмісті  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  10%. Сполука належить до моноклінної сингонії, пр. гр.  $I2/a$ , параметри елементарної комірки:  $a = 0,5195(2)$ ;  $b = 1,1701(1)$ ;  $c = 0,5092(3)$  нм;  $\beta = 90,38(1)^\circ$ ;  $Z = 4$ , має каркасну структуру типу шеєліту. Виявлено умови утворення полів кристалізації  $\text{K}_3\text{Bi}_2(\text{VO}_4)_3$  та  $\text{K}_5\text{Bi}(\text{MoO}_4)_4$ . Показано перспективність використання молібдатних розплавів для оптимізації умов синтезу та контролю морфології моноклінної модифікації  $\text{BiVO}_4$ .*

Створення ефективних фотоелектрохімічних систем для отримання і акумулювання водню потребує розробки нових оксидних матеріалів. Останні характеризуються високою хімічною стабільністю, низькою собівартістю та фотохімічною активністю в гетерогенних системах. Серед новітніх матеріалів, які вважаються перспективними для фотоелектрохімічного окиснення води, виділяють подвійні оксиди системи  $\text{Bi}_2\text{O}_3-\text{V}_2\text{O}_5$  [1–3], наприклад  $\text{BiVO}_4$  [1, 2],  $\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ ,  $\text{Bi}_{3,5}\text{V}_{1,2}\text{O}_{8,25}$ ,  $\text{Bi}_{23}\text{V}_2\text{O}_{44,5}$  та  $\text{Bi}_8\text{V}_2\text{O}_{17}$  [4].

Вказані сполуки володіють комплексом цінних властивостей, в першу чергу іонною провідністю [5], а для ортованадат бісмуту виявлено фероелектричність [6], іонну провідність [7] та фотокаталітичну активність [1]. На сьогодні відомо три поліморфні модифікації  $\text{BiVO}_4$ : дві з них кристалізуються в тетрагональній (структурні типи циркон і шеєліт) та одна в моноклінній сингонії (тип шеєліт). Для останньої було показано найвищу активність у фотохімічних реакціях розкладу води, а також виявлено залежність зазначених властивостей від методу синтезу та морфології відповідних кристалітів [1–2, 8]. Як правило, методом співосадження та гідротермальним підходом вдається отримати полікристалічний матеріал типу циркон, який при тривалому відпалі (діапазон 673–873 К) перетворюється на моноклінну форму. Синтез низькосиметричної моноклінної модифікації ускладнюється оборотним фазовим переходом при 528 К [5].

© К. Л. Бичков, К. В. Тереміленко, М. С. Слободяник, 2014

У даному повідомленні запропоновано новий підхід до отримання моноклінної модифікації  $\text{BiVO}_4$  в умовах розчин-розплавної кристалізації, використовуючи калій молібдат та димолібдат як високотемпературний розчинник.

**Експериментальна частина.** Синтез полікристалічного  $\text{BiVO}_4$  здійснювався у розчинах-розплавах системи  $\text{K}-\text{Bi}-\text{V}-\text{Mo}-\text{O}$ . Як вихідні компоненти використовували  $\text{MoO}_3$  (“х. ч.”),  $\text{V}_2\text{O}_5$  (“о. с. ч.”),  $\text{K}_2\text{CO}_3$  (“х. ч.”) та  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  (“х. ч.”). Стехіометричні кількості реагентів повільно нагрівали в платинових тиглях до температури 700 К, далі швидко — до 1040 К. Отримані гомогенні розплави охолоджували зі швидкістю 20–40 К/год до температури 740–780 К залежно від співвідношення компонентів та в’язкості розплаву. Кристалічні продукти отримували після промивання закристалізованого продукту від залишків плаву в гарячій воді. Вказані зразки досліджувалися ІЧ спектроскопією та порошковою рентгенографією.

ІЧ-спектри цих сполук записували на спектрометрі “Pelkin Elmer Spectrum BX FTIR” у діапазоні частот  $400\text{--}4000\text{ см}^{-1}$  для зразків, що були запресовані в диски з КВг. Рентгенограми отримували за допомогою порошкового дифрактометра Shimadzu XRD-6000 (графітовий монохроматор; метод  $2\theta$  безперервного сканування зі швидкостями 1 або 2 град/хв;  $2\theta = 5,0\text{--}70,0^\circ$ ).

**Результати та їх обговорення.** Аналіз даних літературних джерел показує, що кристалізація оксидних сполук з розпавленої системи  $\text{Bi}-\text{V}-\text{O}$  не може бути використана для отримання чистого ортованадат бісмуту, у зв’язку із появою ряду нестехіометричних подвійних оксидів [4] та леткістю відповідних компонентів. Для зниження температури кристалізації нами вперше запропоновано введення до розплаву додаткового компонента у вигляді  $\text{K}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$  або  $\text{K}_2\text{MoO}_4$ . Для детального дослідження процесів спонтанної кристалізації мольний вміст  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  дорівнював 10%, а співвідношення  $\text{V}/\text{Mo}$  і  $\text{K}/\text{Mo}$  відповідно 0,40–5,70 і 3,40–6,19. Для дослідження ролі молібдатної компоненти кристалоутворення розглядалося при фіксованому мольному вмісті  $\text{MoO}_3$  — 10%, при цьому співвідношення  $\text{K}/\text{V}$  варіювалося від розрізу мета- до ортованадату.

Експериментально встановлено, що гомогенність у таких розплавах досягається за 15–20 хв в ізотермічних умовах при 1040 К. При цьому температура початку кристалізації змінюється в широких межах від 740 К у випадку  $\text{BiVO}_4$  до 980 К у випадку  $\text{K}_3\text{Bi}(\text{VO}_4)_3$ .

Встановлено формування трьох типів кристалічних фаз для обраного розрізу:  $\text{BiVO}_4$ ,  $\text{K}_3\text{Bi}(\text{VO}_4)_3$  та  $\text{K}_5\text{Bi}(\text{MoO}_4)_4$  (табл. 1).

Ортованадат  $\text{BiVO}_4$  утворюється у вигляді голкоподібних кристалів (рис. 1) при співвідношенні  $\text{K}/\text{V} < 1,00$  у вихідному розчині-розпаві. Максимальний вихід 58% від вмісту бісмуту. Полікристалічний зразок ортованадату нерозчинний у воді, розчині Трилону Б, винній кислоті, а також у розбавленій (1 : 2) ортофосфорній і сульфатній кислотах. Повне

Таблиця 1. Склад початкових розчинів-розплавів та отримані сполуки

Мольний вміст вихідного розплаву, %			Сполука	K/Mo	K/V	V/Mo	K/(V + Mo)
MoO <sub>3</sub>	K <sub>2</sub> O	V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>					
10,00	61,87	23,13	$\text{K}_5\text{Bi}(\text{MoO}_4)_4$	6,19	2,68	0,40	1,87
10,00	56,52	28,48	$\text{K}_5\text{Bi}(\text{MoO}_4)_4$	5,65	1,98	3,15	1,47
10,00	50,27	34,73	$\text{K}_5\text{Bi}(\text{MoO}_4)_4$	5,03	1,45	3,80	1,12
10,00	45,21	39,79	$\text{K}_3\text{Bi}_2(\text{VO}_4)_3$	4,52	1,14	4,40	0,91
10,00	40,73	44,27	$\text{BiVO}_4$	4,07	0,92	5,00	0,75
10,00	34,00	51,00	$\text{BiVO}_4$	3,40	0,67	5,70	0,55

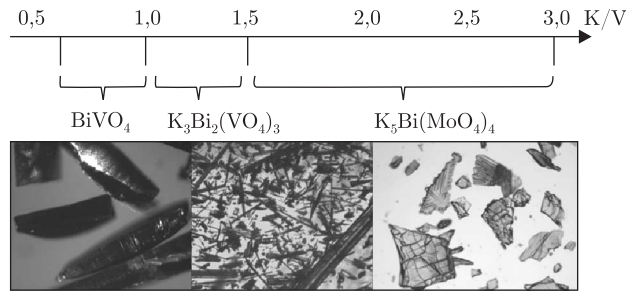


Рис. 1. Особливості кристалотворення сполук у системі К–Ві–V–Мо–О та морфологія відповідних кристалів ( $\times 20$ )

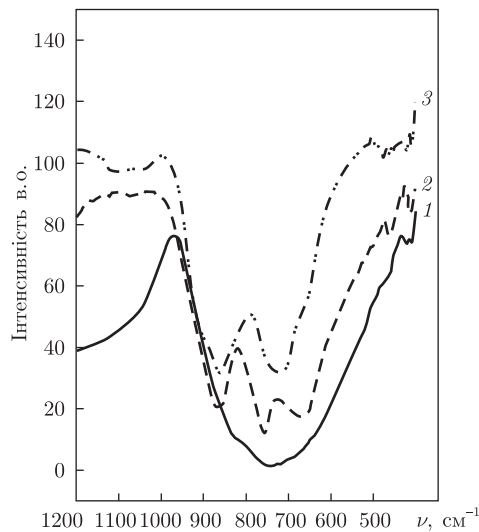


Рис. 2. ІЧ-спектри сполук: 1 –  $\text{BiVO}_4$ ; 2 –  $\text{K}_3\text{Bi}_2(\text{VO}_4)_3$ ; 3 –  $\text{K}_5\text{Bi}(\text{MoO}_4)_4$

розчинення кристалічної фази спостерігається лише при тривалому кип'ятінні у концентрованій нітратній кислоті. ІЧ-спектр,  $\text{cm}^{-1}$ : 409 (сл.), 420 (сл.), 746 (с.), 832 (пл.). Рентгенограма індексована у моноклінній сингонії (пр. гр.  $I2/a$ , параметри елементарної комірки:  $a = 0,5195(2)$ ,  $b = 1,1701(1)$ ,  $c = 0,5092(3)$  нм,  $\beta = 90,38(1)^\circ$ ,  $Z = 4$ ).

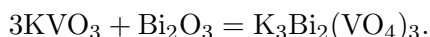
Утворення подвійного ванадату  $\text{K}_3\text{Bi}_2(\text{VO}_4)_3$  у вигляді жовтуватих призматичних кристалів виявлено у випадку початкового вмісту 45,21%  $\text{K}_2\text{O}$  та 39,79%  $\text{V}_2\text{O}_5$ . Вихід 72% від вмісту бісмуту в розплаві. Полікристалічний зразок не розчинний у воді та розбавлених розчинах кислот. ІЧ-спектр,  $\text{cm}^{-1}$ : 415 (сл.), 461 (сл.), 670 (с.), 756 (с.), 859 (с.), 904 (пл.) (рис. 2). Рентгенограма індексована в моноклінній сингонії (пр. гр.  $C2/c$ ), параметри елементарної комірки:  $a = 1,3957(1)$ ,  $b = 1,3858(1)$ ,  $c = 0,7095(1)$  нм;  $\beta = 112,8(2)^\circ$ ;  $Z = 4$ .

Подвійний молібдат  $\text{K}_5\text{Bi}(\text{MoO}_4)_4$  кристалізується у вигляді світло-жовтих зростків, область утворення яких відповідає співвідношенням  $\text{K}/\text{Mo} > 5,03$ ,  $\text{K}/(\text{V} + \text{Mo}) > 1,12$  та мольному вмісту  $\text{V}_2\text{O}_5$  23–35% у початковій шихті. ІЧ-спектр,  $\text{cm}^{-1}$ : 656 (пл.), 726 (с.), 860 (с.), 917 (пл.). Рентгенограма індексована в гексагональній сингонії, параметри елементарної комірки  $a = 0,6024(1)$ ,  $c = 2,083(2)$  нм,  $Z = 1,5$ .

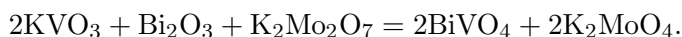
В ІЧ-спектрах ванадатів та молібдату (див. рис. 2) виявлено широку смугу коливань у області 650–850  $\text{cm}^{-1}$ , що відповідає валентним симетричним і асиметричним коливанням

в ізолюваних  $\text{VO}_4^{3-}/\text{MoO}_4^{2-}$  поліедрах. Уширення відповідних смуг зумовлене низькою симетрією відповідних груп та їх нееквівалентністю.

Отримані результати частково корелюють з даними дослідження процесів кристалізації системи  $\text{K}-\text{Bi}-\text{P}-\text{V}-\text{O}$ . Так, при найменших співвідношеннях  $\text{K}/\text{V} = 0,5-2,0$  у такій системі виявлено формування твердих розчинів на основі  $\text{K}_3\text{Bi}_2(\text{VO}_4)_3$ , де частина фосфору заміщена на ванадій [9]. На відміну від даних літературних джерел, у досліджуваній системі  $\text{K}-\text{Bi}-\text{V}-\text{Mo}-\text{O}$  при цих співвідношеннях формування змішано-аніонних сполук не виявлено. Область формування подвійного ванадату в такому випадку виявляється значно вужчою, що може бути представлено схемою:



Участь молібдатної компоненти в складі розплаву зводиться до ролі інертного розчину-розплаву, а тому можна зробити висновок, що формальна кислотність комбінованих молібдатних розплавів нижча у порівнянні з даними статті [9]. З іншого боку, відносно низький вміст лужного компонента вдало регулюється за рахунок зміщення співвідношення  $\text{K}/\text{Mo} = 2-1$ , що відповідає  $\text{K}/\text{V} = 0,5-1,0$ , де спостерігається утворення ортованадату:



У порівнянні з фосфатно-ванадатною системою, де обидві солі є безпосередніми учасниками взаємодії, для системи  $\text{K}-\text{Bi}-\text{V}-\text{Mo}-\text{O}$  при зростанні співвідношення  $\text{K}/\text{Mo}$  зміна полів кристалізації відбувається в послідовності  $\text{BiVO}_4-\text{K}_3\text{Bi}_2(\text{VO}_4)_3-\text{K}_5\text{Bi}(\text{MoO}_4)_4$  без утворення твердих розчинів. Однак завдяки присутності молібдатної компоненти вдається значно знизити температурний інтервал кристалізації і стабілізувати моноклінну модифікацію  $\text{BiVO}_4$ .

Таким чином, нами досліджено закономірності формування ортованадат бісмуту з розчинів-розплавів системи  $\text{K}-\text{Bi}-\text{V}-\text{Mo}-\text{O}$  при співвідношеннях вихідних компонентів  $\text{V}/\text{Mo} = 0,50-6,00$  та  $\text{K}/(\text{V} + \text{Mo}) = 0,55-2,00$  при мольному вмісті  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  10%. Було виявлено умови утворення полів кристалізації  $\text{K}_3\text{Bi}_2(\text{VO}_4)_3$  та  $\text{K}_5\text{Bi}(\text{MoO}_4)_4$ . Показано перспективність використання молібдатних розплавів для оптимізації умов синтезу та контролю морфології моноклінної модифікації  $\text{BiVO}_4$ .

1. *Abdi F. F., Han L., Smets A. H. M. et al.* Efficient solar water splitting by enhanced charge separation in a bismuth vanadate-silicon tandem photoelectrode // *Nature Commun.* – 2013. – No 4. – P. 1–7. Електронне видання, <http://www.nature.com/ncomms/2013/130729/ncomms3195/full/ncomms3195.html>.
2. *Saito R., Miseki Y., Sayama K.* Highly efficient photoelectrochemical water splitting using a thin film photoanode of  $\text{BiVO}_4/\text{SnO}_2/\text{WO}_3$  multi-composite in a carbonate electrolyte // *Chem. Commun.* – 2012. – 48. – P. 3833–3835.
3. *Zhong D. K., Choi S., Gamelin D. R.* Near-complete suppression of surface recombination in solar photoelectrolysis by “Co-Pi” catalyst-modified W:  $\text{BiVO}_4$  // *J. Am. Chem. Soc.* – 2011. – 133. – P. 18370–18377.
4. *Wrobel W., Krok F., Abrahams I. et al.*  $\text{Bi}_8\text{V}_2\text{O}_{17}$  – a stable phase in the  $\text{Bi}_2\text{O}_3-\text{V}_2\text{O}_5$  system // *Mater. Sci. – Poland.* – 2006. – 24, No 1. – P. 23–30.
5. *Beg S., Haneef S., Al-Areqi N. A. S.* Study of electrical conductivity and phase transition in  $\text{Bi}_2\text{O}_3-\text{V}_2\text{O}_5$  system // *Phase Transitions.* – 2010. – 83. – P. 1114–1125.
6. *Bierlein J. D., Sleight A. W. F.* Ferroelasticity in  $\text{BiVO}_4$  // *Solid State Commun.* – 1975. – 16. – P. 69–70.
7. *Hoffart L., Heider U., Huggins R. A. et al.* Crystal growth and conductivity investigations on  $\text{BiVO}_4$  single crystals // *Ionics.* – 1996. – 2. – P. 34–38.
8. *Zhang K., Shi X. J., Kim J. K., Park J. H.* Photoelectrochemical cells with tungsten trioxide/Mo-doped  $\text{BiVO}_4$  bilayers // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2012. – 14. – P. 11119–11124.

9. Городилова Н. А., Баумер В. Н., Затовский И. В. и др. Кристаллизация растворов-расплавов системы  $K_2O-P_2O_5-V_2O_5-Bi_2O_3$  // Неорган. материалы. – 2011. – 47. – С. 198–204.

Київський національний університет  
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 01.11.2013

**К. Л. Бычков, К. В. Теребиленко,**  
член-корреспондент НАН Украины **Н. С. Слободяник**

### **Кристаллообразование $BiVO_4$ с расплавов системы K–Bi–V–Mo–O**

*Оптимизированные условия синтеза  $BiVO_4$  в процессе кристаллизации из расплавов системы K–Bi–V–Mo–O при соотношениях исходных компонентов  $V/Mo = 0,50-6,00$  и  $K/(V + Mo) = 0,55-2,00$  при мольном содержании  $Bi_2O_3$  10%. Соединение кристаллизуется в моноклинной сингонии, пр. гр.  $I2/a$ , параметры элементарной ячейки:  $a = 0,5195(2)$ ,  $b = 1,1701(1)$ ,  $c = 0,5092(3)$  нм,  $\beta = 90,38(1)^\circ$ ;  $Z = 4$ , имеет каркасную структуру типа шеллита. Выявлены условия образования полей кристаллизации  $K_3Bi_2(VO_4)_3$  и  $K_5Bi(MoO_4)_4$ . Показана перспективность использования молибдатных расплавов для оптимизации условий синтеза и контроля морфологии моноклинной модификации  $BiVO_4$ .*

**K. L. Bychkov, K. V. Terebilenko,**  
Corresponding Member of the NAS of Ukraine **N. S. Slobodyanik**

### **Crystal growth of $BiVO_4$ from the K–Bi–V–Mo–O molten system**

*The synthetic conditions of  $BiVO_4$  under the crystallization from the molten system of K–Bi–V–Mo–O at the ratios of the starting components  $V/Mo = 0.50-6.00$  and  $K/(V + Mo) = 0.55-2.00$  with fixed to 10% (mol.) content of  $Bi_2O_3$  are optimized. The compound crystallizes in the monoclinic system, space group  $I2/a$ , with unit cell parameters:  $a = 0.5195(2)$ ,  $b = 1.1701(1)$ ,  $c = 0.5092(3)$  nm;  $\beta = 90.38(1)^\circ$ ;  $Z = 4$ , possessing the scheelite-related structure. The crystallization fields of  $K_3Bi_2(VO_4)_3$  and  $K_5Bi(MoO_4)_4$  under these conditions of synthesis have been determined. It is shown that the application of molybdate melts can be successfully used for the control over the morphology and the structure of monoclinic  $BiVO_4$ .*



І. Б. Демченко, Т. О. Кісельова, Л. Ф. Наражайко, Н. А. Галатенко

## Розробка та дослідження біологічно активного полімерного матеріалу з іммобілізованим вінкристином

(Представлено членом-кореспондентом НАН України Ю. Ю. Керчею)

*Розроблено нові композиційні матеріали на основі розгалужених поліетерглікольуретанів (ПЕГУ) з фізично іммобілізованим протипухлинним препаратом вінкристином (ВН), досліджена їх ефективність. Методом ІЧ спектроскопії встановлено вплив ВН на структуру отриманих композитів. За результатами фізико-механічних випробувань введення ВН до складу ПЕГУ не приводить до погіршення його фізико-механічних показників, зберігаються висока еластичність та міцність при розриві. Отриманий плівковий матеріал може бути рекомендований для подальших медико-біологічних випробувань як матеріал для виготовлення оболонок гідрофільних імплантатів.*

Сучасна полімерна хімія має великий асортимент полімерних матеріалів для використання як носіїв лікарських речовин (ЛР) при створенні біологічно активних полімерних матеріалів (БАПМ) з пролонгованою лікувальною дією.

Як показав аналіз наукових публікацій, існує цілий ряд систем контрольованого вивільнення лікарських препаратів різних за своєю будовою, хімічною природою, способом застосування та механізмом дії у вигляді гелів [1, 2], емульсій, капсул [3], мікросфер [4], трансдермальних терапевтичних систем [5], міцел, кон'югантів, поліелектролітних комплексів як носіїв фармацевтичних препаратів [6, 7] та протипухлинних агентів [8]. Вони широко застосовуються в медичній практиці для терапії патологій.

Одне з перших місць у світовій медичній практиці займає реконструктивно-відновлювальна хірургія, що розвивається в тісному контакті з полімерною хімією. Пластика молочної залози є окремим напрямом реконструктивної хірургії. До недавнього часу в цій сфері використовувалися в основному силіконові ендопротези. Однак ускладнення й небажані побічні ефекти при їхньому застосуванні [9, 10] (розвиток капсулярних контрактур, фіброзів, гематом, кальцифікація) дали поштовх розвитку нового напрямку — створення ендопротезів молочних залоз з поліуретановим покриттям [11].

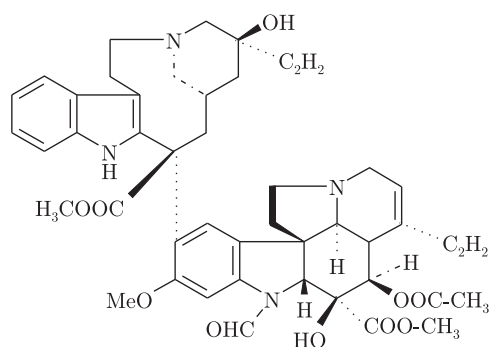
У реконструктивно-пластичній хірургії після мастектомії широке використання імплантатів молочних залоз з поліуретановим покриттям дають гарні естетичні результати та низький ступінь ускладнень [11]. Надання поліуретановому імплантату лікувальних властивостей, зокрема можливості місцево інгібувати розмноження пухлинних клітин, забезпечить підвищення ефективності лікування цього небезпечного захворювання.

Враховуючи високу біосумісність та експлуатаційні характеристики, різноманітність структури та її можливість модифікації, поліуретани є тим класом полімерів як полімерної основи при створенні матеріалів з пролонгованим вивільненням ЛР, який має всі необхідні показники для використання. Було розроблено імплантаційні полімерні матеріали з біологічною активністю на основі біосумісних поліуретанів для лікування патологічних процесів,

а саме пухлин сполучнотканинного походження [12, 13]. Однак залишається ряд невирішених проблем, одна з яких полягає в інгібуванні процесів поділу клітин при солідних пухлинах, меланомі, гемангіомі, канцері молочної залози. Відомо, що одним із важливих прогностичних показників цього захворювання є ангиогенез або судиноутворення. Для росту пухлини необхідне постійне утворення судин, яке забезпечує живлення та виділення продуктів життєдіяльності.

Для роз'язання проблем, пов'язаних з можливістю повторного утворення пухлин з клітин навколишньої тканини, нами було поставлено завдання розробити плівковий матеріал для оболонок гідрофільних імплантатів молочної залози, який має цитостатичний ефект у місці використання.

Перспективним фармакологічним препаратом для цілей іммобілізації на полімерному носії є вінкрисдин (*Vincristine*) — 22-Оксовінкалейкобластин (у вигляді сульфату 1 : 1),  $C_{46}H_{56}N_4O_{10}$ :

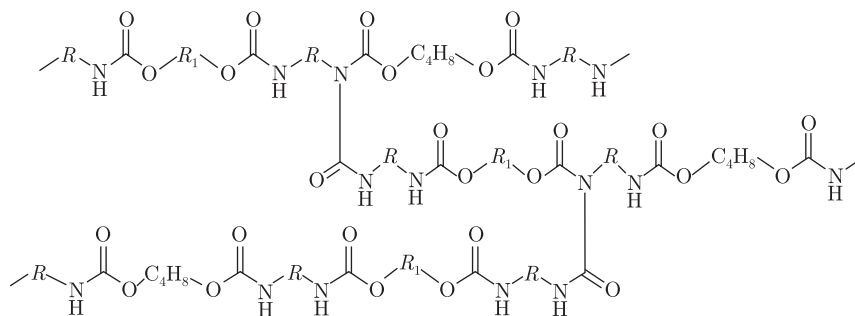


Вінкрисдин (ВН) — виявляє цитотоксичну дію, оскільки вибірково пригнічує синтез РНК і ДНК. При введення 0,001 г/мл препарату гнітється множення клітин. Цитотоксичний ефект виявляється в основному на гранулопоезі, меншою мірою — на мегакарію й еритропоезі. В малих дозах він впливає на М-фазу, у більших — на всі фази мітотичного циклу. Застосовується при канцері молочної залози й інших пухлинах (лімфомах, меланомах тощо).

Залежно від області застосування кожний імплантаційний матеріал повинен мати певні фізико-механічні властивості. Поліуретановий матеріал, придатний для ендопротезування м'яких тканин, поряд з достатньою міцністю при розриві повинен мати високу еластичність. Ми вважаємо, що розгалужені поліетерглікольуретани (ПЕГУ) підходять за своїми показниками для цих цілей. Розгалужені ПЕГУ були синтезовані на основі поліоксипропіленгліколю (ПОПГ 1000), 2,4-; 2,6-толуїлендіізоціанату (ТДІ 80/20), 1,4-бутандіолу (БД) як подовжувача макроланцюга. Реакцію проводили при варіюванні кількості вільних ізоціанатних груп ізоціанатного форполімеру від 6,99 до 9,50% [14].

Відомо [15], що залежно від умов синтезу поліуретанів (ПУ) крім основних реакцій уретаноутворення можливе проходження побічних, що супроводжуються виникненням вторинних зв'язків — алофанатних і біуретових, які й визначають просторову будову полімеру. Розгалуження лінійних ПУ, отриманих з діолу і діізоціанату (у нашому випадку — з ізоціанатних форполімерів з надлишком вільних NCO-груп), може відбуватися внаслідок формування алофанатів. Розгалужена будова синтезованих ПЕГУ доведена методом ІЧ спектроскопії шляхом якісного визначення вторинних зв'язків по ІЧ-спектрах їх амінолізу діетиламіном [14].

Структурну формулу ПЕГУ представлено таким чином:



де  $R$  — залишок ТДІ 80/20;  $R_1$  — залишок ПОПГ 1000.

У результаті вивчення властивостей синтезованих ПЕГУ залежно від вмісту вільних ізоціанатних груп МДІ встановлено, що ПЕГУ на основі ПОПГ, ТДІ й БД із надлишком 7,5% вільних ізоціанатних груп ізоціанатного форполімеру має оптимальні фізико-механічні властивості, характеризується високим вологопоглинанням, повільним перебігом біодеградації зі збереженням високої еластичності [13]. Це дає змогу використовувати його як перспективний матеріал для подальшої модифікації ЛР для отримання імплантаційних біологічно активних імплантаційних матеріалів (БАІМ) з пролонгованою лікувальною дією.

З метою розробки БАІМ на основі розгалужених ПУ, здатних інгібувати ріст пухлини молочної залози, проведена іммобілізація ВН на ПЕГУ. Кількість іммобілізованого препарату на полімерному носії не перевищувала його фармакологічної дози й становила 0,01 й 0,02% за масою. Іммобілізацію ВН здійснювали шляхом його введення в 20% розчин ПЕГУ в  $N,N'$ -диметилацетаміді в кількості 0,01 й 0,02 мг на 100 мл розчину, з подальшим перемішуванням впродовж 20 хв при температурі 50 °С. Зразки полімеру з іммобілізованим ВН у вигляді прозорих плівок отримували шляхом поливу композиції на тефлонове коло та сушінням до постійної маси протягом 10 діб при 70 °С.

Отриманий плівковий матеріал був випробуваний на механічні властивості. Встановлено, що в порівнянні з контролем значних змін у фізико-механічних показниках введення ЛР не чинило. Незначно змінювалася міцність при розриві при введенні 0,02% за масою ВН у полімерну композицію, а введення 0,01% за масою приводило до незначного збільшення відносного подовження (табл. 1).

Таким чином, введення ВН до складу поліуретанового носія істотно не змінює механічні показники полімерного плівкового матеріалу і ВН може бути використаний для виготовлення оболонки молочної залози.

Методом ІЧ спектроскопії були зняті спектри лікарського препарату ВН, полімерного носія ПЕГУ, а також полімеру з фізично іммобілізованим ВН в кількості 0,01, 0,02 й 5,0% за масою. ІЧ-спектр вінкристину характерний для комплексної (координаційної) сполуки.

Таблиця 1. Фізико-механічні властивості біологічно активного полімерного матеріалу з вінкристином

Зразок	Міцність при розриві, МПа	Відносне подовження при розриві, %
ПЕГУ	0,009±0,0009	397
ПЕГУ — 0,01% ВН	0,01±0,001	450
ПЕГУ — 0,02% ВН	0,03±0,003	345

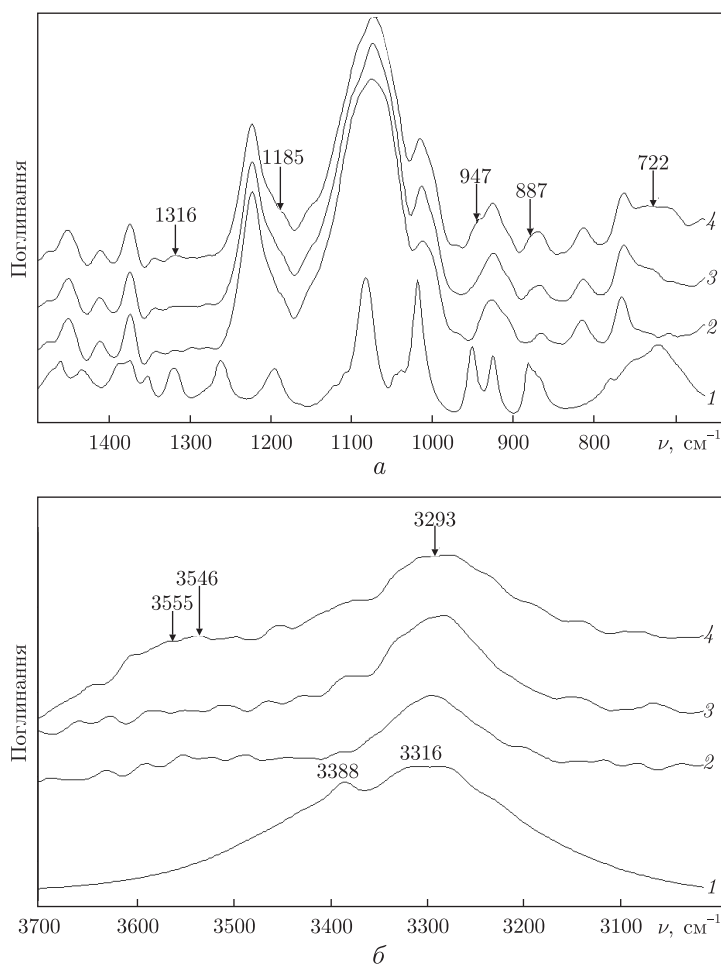


Рис. 1. Фрагмент ІЧ-спектрів (а і б): 1 — вінкристин; 2 — ПЕГУ; 3 — ПЕГУ–0,01% ВН; 4 — ПЕГУ–0,05% ВН

Молекула ВН є складною органічною сполукою в сольовій формі, що пояснює відсутність в її спектрі смуг поглинання естерної групи (COO) карбоксилу, які присутні у вигляді іонної форми (COO<sup>-</sup>). На ІЧ-спектрі ВН (крива 1 на рис. 1, а) основними смугами є смуги валентних і деформаційних коливань СН-зв'язку груп СН, СН<sub>2</sub>, СН<sub>3</sub>, циклічних і ароматичних кілець, а також смуги валентних коливань третинної ОН-групи. Структура молекули ВН припускає наявність сильних внутрішньо молекулярних зв'язків ОН-груп, а також міжмолекулярних зв'язків, які не руйнуються навіть у водних розчинах. Смуги валентних коливань ОН-груп визначаються піками — 3388 і 3316 см<sup>-1</sup> (див. криву 1 на рис. 1, б), а смуги валентних коливань С–О проявляються в області 1000–1200 см<sup>-1</sup> (див. криву 1 на рис. 1, а).

При введенні до складу ПЕГУ вінкристину в кількості 0,01 й 0,02% за масою змін на ІЧ-спектрі практично не спостерігається (див. криві 2 і 3 на рис. 1). Деякі зміни відзначаються для ПЕГУ, який містить 5,0% за масою ВН (див. криву 4 на рис. 1, а); кількість препарату було збільшено з метою його кращої ідентифікації на полімерному носії. Спостерігається збільшення інтенсивності та незначне зміщення положень смуг валентних і деформаційних коливань 1316, 1185, 947, 887 і 722 см<sup>-1</sup> ПЕГУ внаслідок накладання ана-



Рис. 2. Формування компактної, сіткоподібної зони, зони мігруючих фібробластичних елементів на 5 добу культивування. Мікрофотографія. Зб. 100

логічних смуг поглинання ВН. Інтенсивна подвійна смуга валентних коливань NH-груп ВН в області  $3000\text{--}3700\text{ см}^{-1}$  (див. криву 1 на рис. 1, б), накладається на аналогічну смугу валентних коливань NH-груп ПЕГУ (див. криву 2 на рис. 1, б), але її положення на спектрі ПЕГУ-0,5% ВН залишається без зміни (див. криву 4 на рис. 1, б), тобто ЛР у складі ПЕГУ не змінює своєї структури.

Присутність ВН у більших кількостях (5% за масою) приводить до появи на ІЧ-спектрі ПУ слабкої широкої смуги з максимумом  $3555\text{ см}^{-1}$  слабозв'язаних й вільних NH-груп ПУ (див. криву 4 на рис. 1, б), які з'являються в результаті проникнення молекул ВН між молекулами ПУ — фізична іммобілізація. Аналогічні висновки можна зробити і для малих концентрацій ВН.

З метою з'ясування ефективності розробленого біологічно активного плівкового матеріалу нами були проведені дослідження на тканинній культурі підшкірної клітковини білих щурів, що дає в умовах культивування ріст фібробластичних елементів. Досліджувалися такі матеріали: ПЕГУ; ПЕГУ — 0,2% ВН (див. табл. 1).

Полімерний плівковий матеріал з іммобілізованим ВН (ПЕГУ — 0,2% ВН) поміщали у флакони Карелля. Площа плівки у флаконі  $1\text{ см}^2$ . Культивування здійснювали шляхом експлантації матеріалу в згусток плазми. Модельним середовищем слугувало біологічне середовище 199, за контроль брали культивовану підшкірну жирову тканину білих щурів. Для стандартизації характеру росту культур зони класифікували на компактну, сіткоподібну і зону мігруючих клітин, критерієм для виділення яких було розташування зростаючих фібробластичних елементів. Внесення плівкового матеріалу проводили на 3 добу культивування, коли починалася міграція фібробластичних елементів у флаконах. Дослідження росту і розвитку клітинних елементів підшкірної клітковини білих щурів проводили на 5, 7, 10 й 14 добу культивування.

Згідно з проведеними дослідженнями, на 5 добу спостереження в контролі відбувалося формування сіткоподібної зони, зони мігруючих фібробластичних елементів і початок утворення компактної зони (рис. 2)

Внесення в контрольні флакони плівкового матеріалу без ВН (ПЕГУ) на 3 добу не приводить до істотних змін у динаміці росту та розвитку тканинної культури на 5 й 7 добу. Продовжується активне ділення фібробластичних та фібробластоподібних елементів з формуванням третьої компактної зони росту фібробластичних елементів.

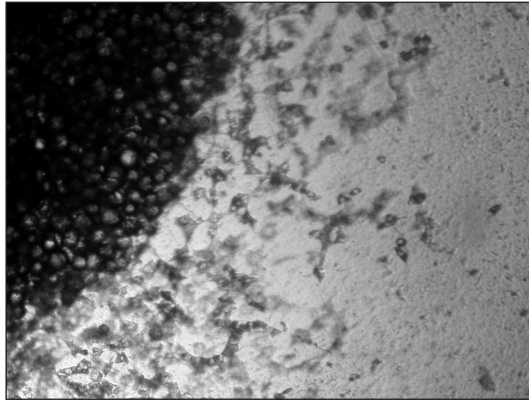


Рис. 3. Дегенеративні зміни фібробластичних елементів на 5 добу культивування. Мікрофотографія. Зб. 100

При внесенні до флаконів плівкового матеріалу ПЕГУ–0,02% ВН на 5 добу спостерігаються дегенеративні зміни фібробластичних елементів, які виражаються у вакуолізації та зернистому переродженні клітин із разом об'єднаними зонами росту (рис. 3). На 7 добу настає повна дегенерація клітин, а клітин, які діляться, не відзначається.

Таким чином, можна зробити висновок, що на основі ПЕГУ з іммобілізованим ВН отриманий плівковий матеріал, який має достатні фізико-механічні показники, проявляє цитотоксичний ефект та може бути рекомендований до подальших медико-біологічних випробувань як матеріал оболонок імплантатів молочної залози, застосовуваних при пухлинах та мастектомії.

1. *Kebuladze I. M.* Application of endoscopic techniques for implantation of PAAG Interfall gel at contour mamma plastic // *Ukr. J. Non-invas. and Endoscop. Surg.* – 2001. – No 4. – P. 7–9.
2. *Patel V., Amiji M.* Preparation and characterization of freeze-dried chitozan-poly(ethylene oxide) hydrogels for site-specific antibiotic delivery in the stomach // *Pharmaceutical Research.* – 1996. – **13**, No 4. – P. 588–593.
3. *Jiang B., Hu L., Gao Ch. et al.* Crosslinked polysaccharide nanocapsules: preparation and drug release properties // *Acta Biomater.* – 2006. – **2**. – P. 9–18.
4. *Marie E., Landfester K., Antonietti M.* Synthesis of chitozan-stabilized polymer dispersions, capsules, and chitosan grafting products via miniemulsion // *Biomacromolecules.* – 2002. – No 3. – P. 475–481.
5. *Markoishvili K., Tsitlanadze G., Katsarava R. et al.* A novel sustained-release matrix based on biodegradable poly(ester amide)s and impregnated with bacteriophages and an antibiotic shows promise in management of infected venous stasis ulcers and other poorly healing wounds // *Int. J. Dermatol.* – 2002. – **41**. – P. 453–458.
6. *Acosta N., Aranaz I., Peniche C. et al.* Tramadol release from a delivery systems based on alginate-chitosan microcapsules // *Macromolec. Bioscience.* – 2003. – **3**, No 10. – P. 546–551.
7. *Pitarresi G., Cavallaro G., Giammona G. et al.* New hydrogel matrices containing an antiinflammatory agent. Evaluation of in vitro release and photoprotective activity // *Biomaterials.* – 2002. – **23**. – P. 407 – 412.
8. *Park J. H., Kwon S., Lee M. et al.* Self-assembled nanoparticles based on glycol chitosan bearing hydrophobic moieties as carriers for doxorubicin: In vivo biodistribution and anti-tumour activity // *Ibid.* – 2006. – **27**. – P. 119–126.
9. *Collis N., Coleman D., Foo I. T. N. et al.* Ten-year review of prospective randomized controlled trial of textured versus smooth subglandular silicone gel breast implants // *Plastic and Reconstructive Surgery.* – 2000. – **106**. – P. 786–791.
10. *Niessen F. B., Spauwen P. H. M., Robinson P. H. et al.* The use silicone occlusive sheeting (Sil-K) and silicone occlusive gel (epiderm) in the prevention of hypertrophic scar formation // *Ibid.* – 1998. – **6**, No 102. – P. 1962. – 1972.

11. Gasperoni C., Algarello M., Gardani G. Polyurethane coated mammary implants: a 12-year experience // Ann. Plastic Surgery. – 1992. – **29**. – P. 303–308.
12. Галатенко Н. А., Барабой В. А., Толстопятов Б. А. и др. Влияние полимерной композиции с левамизолом на рост саркомы 45 // Эксперимент. онкология. – 1991. – **13**, № 2. – С. 59–62.
13. Рожнова Р. А. Синтез та дослідження розгалужених поліетергліколюретанів в якості імплантацийного матеріалу // Полімер. журн. – 2006. – **28**, № 4. – С. 297–302.
14. Саундерс Дж., Фриш К. Химия полиуретанов. – Москва: Химия, 1968. – 460 с.

Інститут хімії високомолекулярних сполук  
НАН України, Київ

Надійшло до редакції 11.11.2013

**И. Б. Демченко, Т. А. Киселева, Л. Ф. Наражайко, Н. А. Галатенко**

### **Разработка и исследования биологически активного полимерного материала с иммобилизованным винкристином**

*Разработаны новые композиционные материалы на основе разветвленных полиэфиргликолюретанов (ПЭГУ) с физически иммобилизованным противоопухолевым препаратом винкристином (ВН), исследована их эффективность. Методом ИК спектроскопии установлено влияние ВН на структуру полученных композитов. По результатам физико-механических испытаний введение ВН в состав ПЭГУ не приводит к ухудшению его физико-механических показателей, сохраняются высокая эластичность и прочность при разрыве. Полученный пленочный материал может быть рекомендован для дальнейших медико-биологических испытаний в качестве материала для изготовления оболочек гидрофильных имплантатов.*

**I. B. Demchenko, T. A. Kiseleva, L. Ph. Narazhajko, N. A. Galatenko**

### **Development and researches of a biological active polymeric material with immobilized Vincristine**

*New composite materials on the basis of branched out polyether glycol urethane (PEGU) with physically immobilized antineoplastic preparation Vincristine are developed, and their efficiencies are investigated. The method of IR-spectroscopy established the influence of Vincristine on the structure of the received composites. By results of physical-mechanical tests, the introduction of Vincristine into the structure of PEGU doesn't lead to a deterioration of its physical-mechanical properties, and its high elasticity and tensile strength are conserved. The obtained film material can be recommended for the passing of further medical-biological tests as a material for the production of covers of hydrophilic implants.*



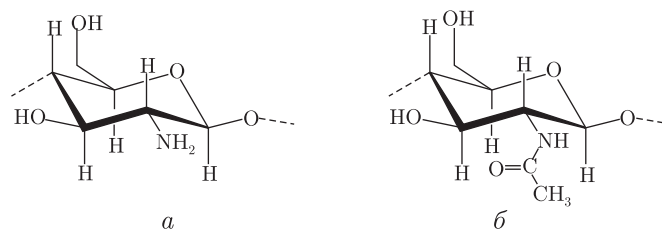
О. Ю. Жолобок, І. Т. Тарнавчик, А. С. Воронов,  
О. Г. Будішевська, А. М. Когут, С. А. Воронов

## Особливості формування гідрогелів на основі хітозану та поліетиленглікольдисукцинатів шляхом термообробки

(Представлено членом-кореспондентом НАН України Ю. Ю. Керчею)

Досліджено при термічній обробці взаємодію поліетиленглікольдисукцинатів з 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-глюкопіранозидом (1-бензилглюкозаміном), який є моделлю мономерної ланки макромолекули хітозану, без використання додаткових активаторів функціональних груп або каталізаторів. Встановлено, що при цьому відбувається реакція між аміногрупами 1-бензилглюкозаміну і карбоксильними групами поліетиленглікольдисукцинатів з утворенням ковалентних амідних зв'язків. Одночасно проходить також реакція амінолізу естерних зв'язків поліетиленглікольдисукцинатів під дією аміногруп 1-бензилглюкозаміну, в результаті якої також утворюються міжмолекулярні амідні зв'язки. Синтезовано нові біосумісні ковалентно зшиті гідрогелі на основі хітозану і поліетиленглікольдисукцинатів, полімерний каркас яких формується за цими реакціями. Властивості нових гідрогелів, зокрема набрякання, здатність до солубілізації ліків, фізико-механічні характеристики можуть контролюватися в широких межах зміною концентрації полімерів, співвідношення функціональних груп COOH : NH<sub>2</sub> та довжини поліетиленгліколевого ланцюга.

Хітозан — гідрофільний полімер, який зазвичай отримують за допомогою лужного деацетилювання хітину, що є основним компонентом екзоскелета членистоногих, таких як ракоподібні, комахи, павукоподібні тощо [1]. За хімічною будовою хітозан — це полі-β-1,4-(2-аміно-2-дезоксид-глюкопіраноза) (а) з деякою часткою ланок 2-ацетиламіно-2-дезоксид-глюкопіранози (б):



Хітозан і хітин знаходять широке застосування в медичній і фармацевтичній промисловості завдяки своїм унікальним властивостям [2]. Хітозан є біодеградабельним, нетоксичним, біосумісним і біоадгезивним природним полімером [3, 4], має протимікробну, протівірусну і протипухлинну активність [5, 6], а також є хорошим кровоспинним, гіпохолестеролемічним і гіполіпідемічним агентом [3, 4]. Крім того, хітин дуже поширений у природі, а виробництво хітозану є недорогим.

Сучасні гідрогелі на основі хітозану, такі як гідрогелеві нано- й мікрочастинки [7], та планарні гідрогелі широко досліджуються в процесах пролонгованої доставки ліків [8], як

© О. Ю. Жолобок, І. Т. Тарнавчик, А. С. Воронов, О. Г. Будішевська, А. М. Когут, С. А. Воронов, 2014





*Синтез 1-О-бензил-2-ацетиламіно-2-дезоксид-глюкопіранозиду.* 2-Ацетиламіно-2-дезоксид- $\alpha$ -D-глюкопіранозу (3 г, 13,5 ммоль) і бензиловий спирт (22 мл, 0,20 моль) розчиняли в толуолі (36 мл) і додавали моногідрат *n*-толуолсульфоїкислоти (0,15 г, 1,15 ммоль). Реакційну суміш поміщали в реактор з насадкою Діна–Старка, кип'ятили впродовж 5 год і відділяли воду, яка утворювалась у ході реакції. Реакційну суміш охолоджували до кімнатної температури, додавали насичений розчин NaHCO<sub>3</sub> для нейтралізації *n*-толуолсульфоїкислоти і відганяли толуол при пониженому тиску. Після цього додавали 80 мл суміші діетилового етеру і *n*-гексану в співвідношенні 2 : 1 і енергійно перемішували впродовж 3 год. Осад коричневого кольору відфільтровували, промивали діетиловим етером, перекристалізували з етанолу і отримували світло-коричневі кристали 1-О-бензил-2-ацетиламіно-2-дезоксид-глюкопіранозиду з виходом 50%.

*Синтез гідрохлориду 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-глюкопіранозиду.* 1-О-бензил-2-ацетиламіно-2-дезоксид-глюкопіранозид (2,1 г, 6,75 ммоль) розчиняли в етанолі (40 мл), додавали КОН (12,0 г, 0,214 моль) і кип'ятили протягом доби в атмосфері азоту. Реакційну суміш отримували до 0 °С і нейтралізували 35%-ю хлоридною кислотою (21,7 мл, 0,214 моль). Утворений осад відфільтровували, а фільтрат витримували при температурі –18 °С. Кристали гідрохлориду 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-глюкопіранозиду, що утворилися, відфільтровували і висушували. Будову підтверджували за допомогою <sup>1</sup>H ЯМР спектроскопії.

*Синтез 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-глюкопіранозиду.* Гідрохлорид 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-глюкопіранозиду (0,2 г) розчиняли в метанолі (3 мл) і додавали K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (0,5 г), перемішували впродовж 20–30 хв, осад відфільтровували. З фільтрату у вакуумі відганяли метанол, а отриманий залишок (1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-глюкопіранозид) відразу використовували для подальших досліджень.

*Взаємодія 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-глюкопіранозиду з 2СК-ПЕГ<sub>300</sub>* проводили, змішуючи їх і витримуючи при температурі 120 °С впродовж 3 год.

*ІЧ-спектри* зразків 2СК-ПЕГ отримували в тонкому шарі з бензольного розчину на KBr з використанням приладу Thermo Scientific Nicolet Fourier Transform Infrared Spectrometer в діапазоні 500–4000 см<sup>-1</sup> з розрішенням 4 см<sup>-1</sup> і компенсацією атмосферного CO<sub>2</sub> й H<sub>2</sub>O.

*<sup>1</sup>H ЯМР спектри* зразків 2СК-ПЕГ, моноглюкозаміну 2-аміно-2-дезоксид- $\alpha$ -D-глюкопіранози та його похідних отримували в дейтерованих розчинниках (ацетоні-d<sub>6</sub>, хлороформі-d, дейтерованій воді) з використанням приладу 500 MHz Varian Inova spectrometer. Розчинник містив внутрішній стандарт. Концентрація речовини — 1,0%.

**Результати та їх обговорення.** *Дослідження утворення ковалентного зв'язку при взаємодії глюкозаміну як моделі ланки хітозану та 2СК-ПЕГ.* Відомо, що хітозан і його похідні обмежено розчинні в дейтерованих розчинниках, які використовуються для зняття <sup>1</sup>H ЯМР спектрів. Це унеможливає дослідження утворення ковалентних зв'язків за участю хітозану за допомогою ЯМР спектроскопії. Тому з метою дослідження утворення ковалентного зв'язку між аміногрупами хітозану та карбоксильними групами зшивача 2СК-ПЕГ використано глюкозамін, який є мономерною ланкою макромолекули хітозану. Взаємодію проводили в умовах термообробки без використання додаткових каталізаторів або активаторів карбоксильних груп.

Використання 2-аміно-2-дезоксид-глюкопіранози (тобто глюкозаміну у вільній формі) звичайно приводить до утворення основи Шиффа в умовах термостатування. Тому як модель мономерної ланки хітозану було застосовано 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-глюкопіранозид (рис. 1), який отримували алкілюванням 2-ацетиламіно-2-дезоксид-глюкопіранози

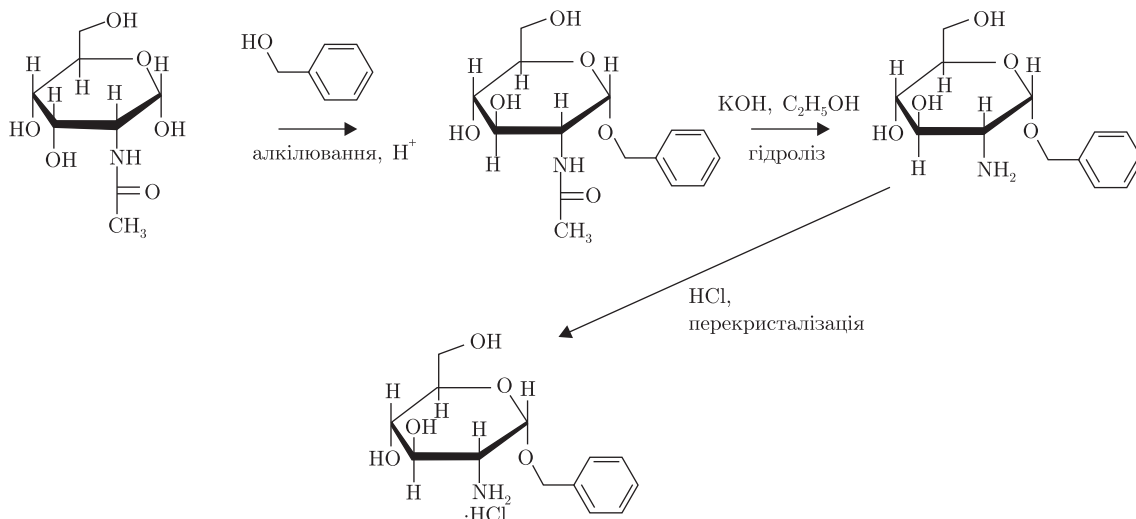


Рис. 1. Синтез гідрохлориду 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозиду

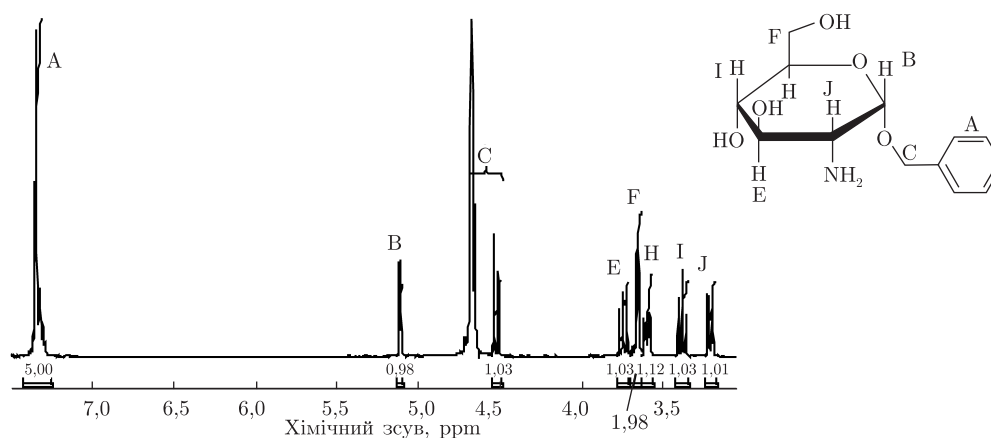


Рис. 2.  $^1\text{H}$  ЯМР спектр гідрохлориду 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозиду

бензиловим спиртом. Реакцію проводили в толуольному розчині в присутності *n*-толуолсульфо кислоти як каталізатора, в ході реакції отримували 1-О-бензил-2-ацетиламіно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозид. Будову синтезованого продукту підтверджували за допомогою  $^1\text{H}$  ЯМР спектроскопії (спектр не наведено).

Зняття ацетильного захисту аміногрупи проводили за допомогою лужного гідролізу в етиловому спирті та отримували 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозид. Оскільки ця речовина нестабільна при зберіганні, її переводили у форму солі — гідрохлориду, яку виділяли з реакційної маси і очищали від домішок за допомогою перекристалізації. Будову отриманого гідрохлориду 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозиду підтверджено методом  $^1\text{H}$  ЯМР спектроскопії. На рис. 2 наведено його  $^1\text{H}$  ЯМР спектр, знятий у  $\text{D}_2\text{O}$ . У спектрі присутні 8 груп сигналів, які відповідають протонам 2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозного та бензильного фрагментів.

Для дослідження перебігу взаємодії 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозиду з поліетиленглікольдисукцинатами гідрохлорид 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозиду обробляли карбонатом калію, після чого продукт з вільними аміногрупами (1-О-бен-

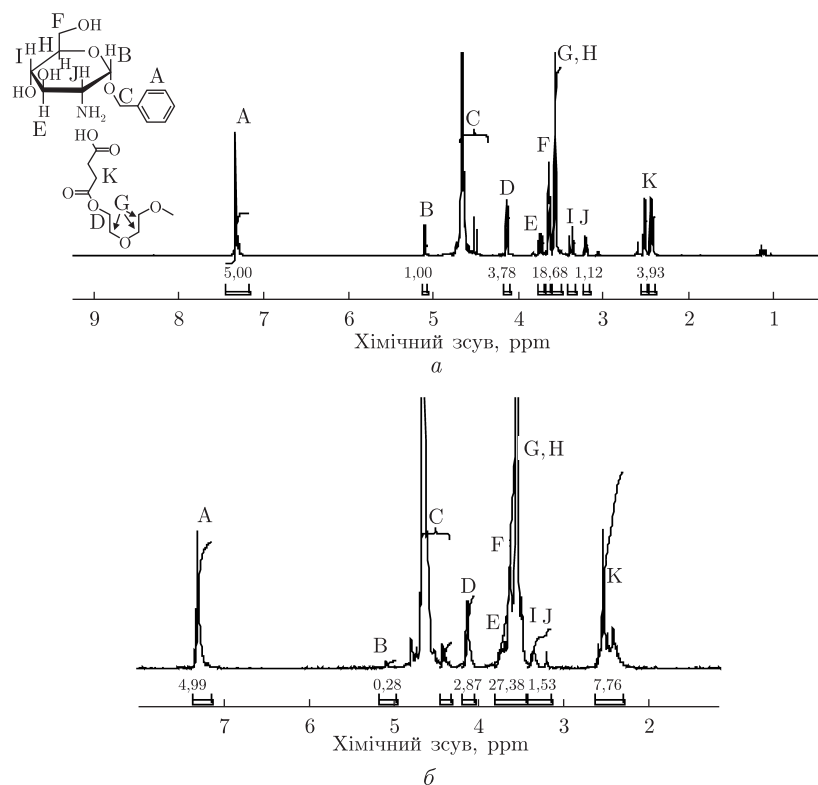


Рис. 3.  $^1\text{H}$  ЯМР спектри у  $\text{D}_2\text{O}$  суміші 1 : 0,6 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид- $\text{D}$ -глюкопіранозиду та 2СК-ПЕГ $_{300}$  до (а) та після (б) термічної обробки

зил-2-аміно-2-дезоксид- $\text{D}$ -глюкопіранозид) змішували з 2СК-ПЕГ $_{300}$  і проводили реакцію в масі в умовах термічної обробки при температурі  $120^\circ\text{C}$  впродовж 3 год. На рис. 3 наведено  $^1\text{H}$  ЯМР спектри суміші 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид- $\text{D}$ -глюкопіранозиду і 2СК-ПЕГ $_{300}$  до термічної обробки та продукту їх взаємодії після термостатування.

Як видно з отриманих спектрів, термостатування суміші 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид- $\text{D}$ -глюкопіранозиду та 2СК-ПЕГ $_{300}$  приводить до значної зміни інтегральних інтенсивностей протонів "В" й "D". Разом з тим протони "К", які належать метиленовим фрагментам залишків бурштинової кислоти, зміщуються в бік слабкого поля, що свідчить про вичерпування карбоксильних груп на реакцію ацилювання. Зменшення ж інтенсивності сигналів протонів "D" може вказувати на перебіг процесів, які супроводжуються втратою естерних зв'язків ПЕГ-дисукцинату. Хоча дані спектри і підтверджують, що залишки бурштинової кислоти вступають у реакцію, вони не дозволяють визначити, яка саме нуклеофільна група 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид- $\text{D}$ -глюкопіранозиду (гідроксил при третьому, четвертому або шостому атомі карбону або ж аміногрупа глюкозаміну) бере участь в утворенні ковалентних зв'язків у результаті термообробки модельного моносахариду. Тому з метою виявлення груп, що вступають у реакцію ацилювання, суміш 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид- $\text{D}$ -глюкопіранозиду з 2СК-ПЕГ $_{300}$  було ацетильовано оцтовим ангідридом у присутності триетиламіну до термообробки і після неї. Інтегральні інтенсивності сигналів протонів ацетильних груп, введених у склад модельного глюкозаміну, дозволили зробити якісні та кількісні висновки про перебіг реакції ацилювання 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид- $\text{D}$ -глюкопіранозиду дисукцинатом ПЕГу при термообробці.

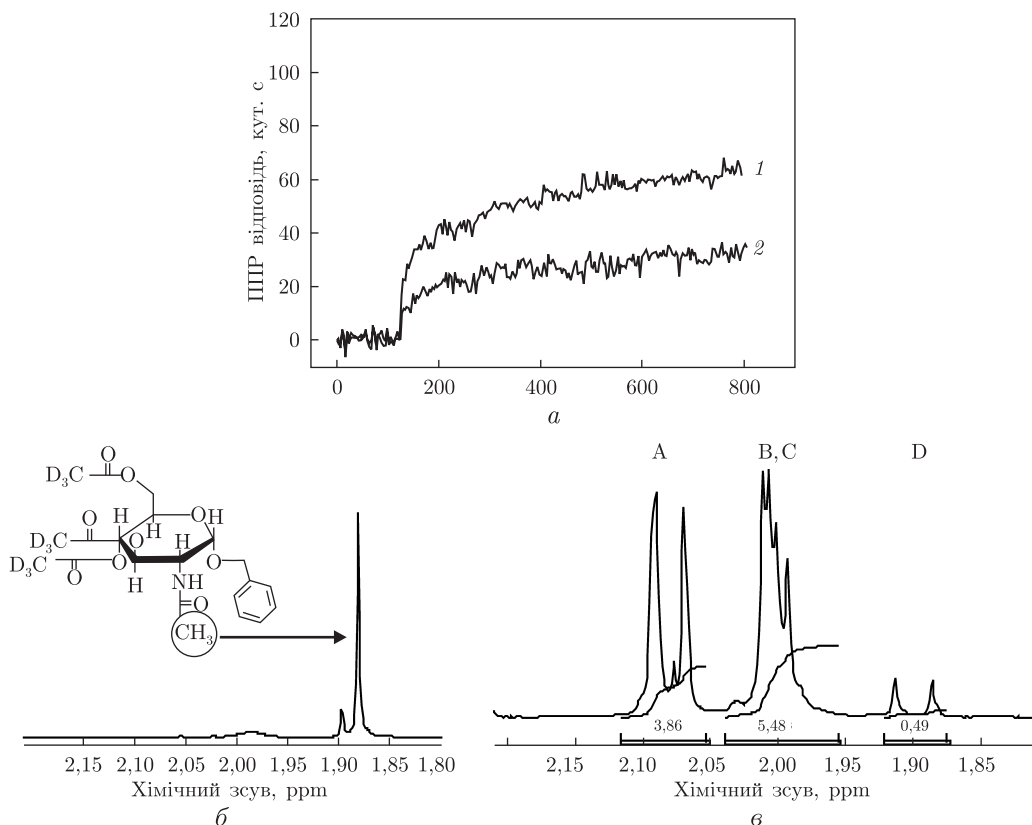


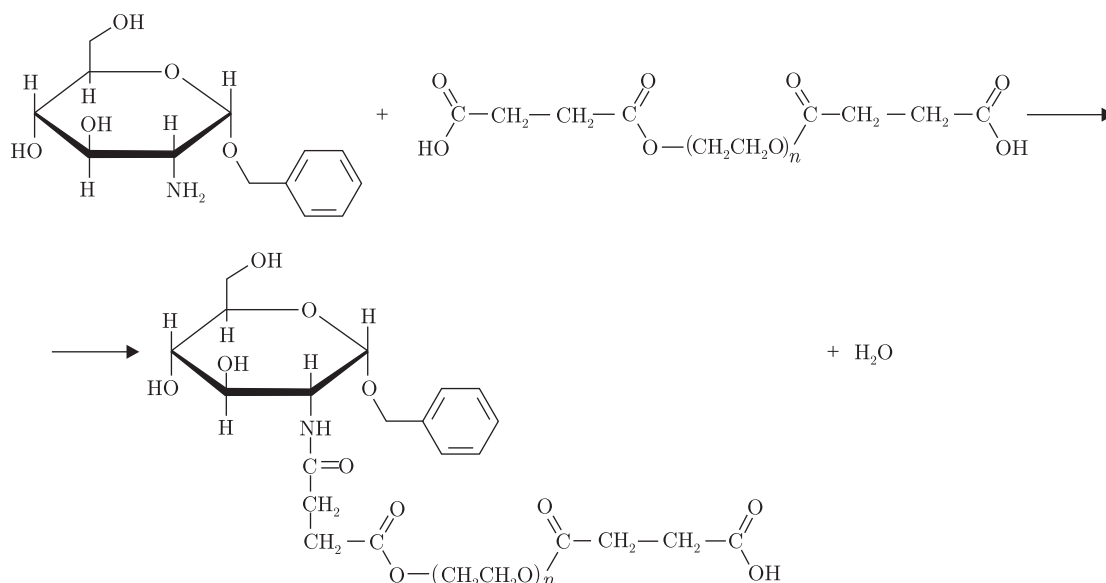
Рис. 4. Ділянки  $^1\text{H}$  ЯМР-спектрів ацетильованих продуктів до (а) та після (в) попередньої термообробки суміші 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозиду з 2СК-ПЕГ<sub>300</sub> та 1-О-бензил-2-ацетиламіно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозиду (б), ацетильованого дейтерованим оцтовим ангідридом

Ділянку  $^1\text{H}$  ЯМР спектра суміші 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозиду та 2СК-ПЕГ<sub>300</sub>, ацетильованої за допомогою оцтового ангідриду, ілюструє рис. 4, а. Продукт взаємодії 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозиду та 2СК-ПЕГ<sub>300</sub> був отриманий при прогріванні суміші двох речовин впродовж 3 год при 120 °С. Синтезований продукт обробляли оцтовим ангідридом. Ділянку спектра ацетильованого продукту демонструє рис. 4, в.

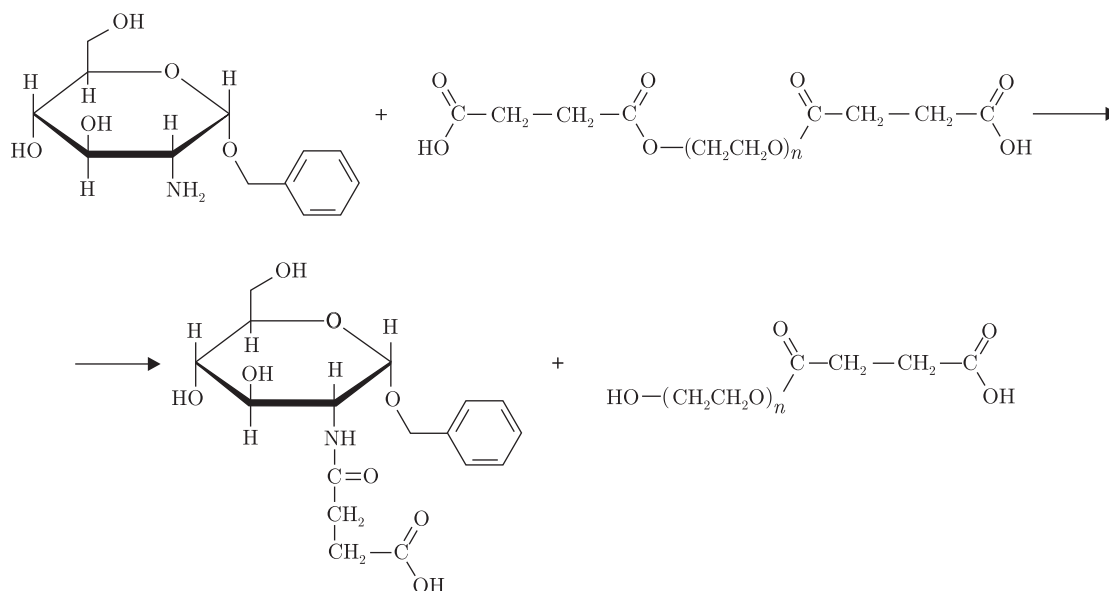
З порівняння наведених спектрів видно, що після ацетилювання продукту взаємодії 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозиду з 2СК-ПЕГ<sub>300</sub>, який отримували в умовах термообробки, помітна істотна нестача (порівняно зі спектром непрогрітої суміші) протонів з хімічним зсувом 1,88 м. ч., які, очевидно, відповідають ацетильним групам біля атома азоту (тобто  $\text{CH}_3-\text{C}(\text{O})-\text{NH}-$ ).

Оскільки хімічний зсув протонів ацетильної групи, введеної у склад молекули 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозиду, слабо залежить від того, через який атом утворено зв'язок між ацетильною групою і залишком моносахариду, для визначення положення хімічного зсуву N-ацетамідних протонів було здійснено ацетилювання 1-О-бензил-2-ацетиламіно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозиду дейтерованим оцтовим ангідридом і знято  $^1\text{H}$  ЯМР спектр продукту реакції (див. б на рис. 4). Оскільки відомо, що дейтеровані ацетильні групи не дають сигналів в  $^1\text{H}$  ЯМР спектрі, то імовірно, що пік з хімічним зсувом 1,88 м. ч. відповідає протонам ацетамідної групи.

Отже, при термічній обробці 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-глюкопіранозиду і ПЕГ-дисукцинату за рахунок взаємодії аміногрупи з карбоксильною групою відбувається утворення амідного зв'язку за схемою:



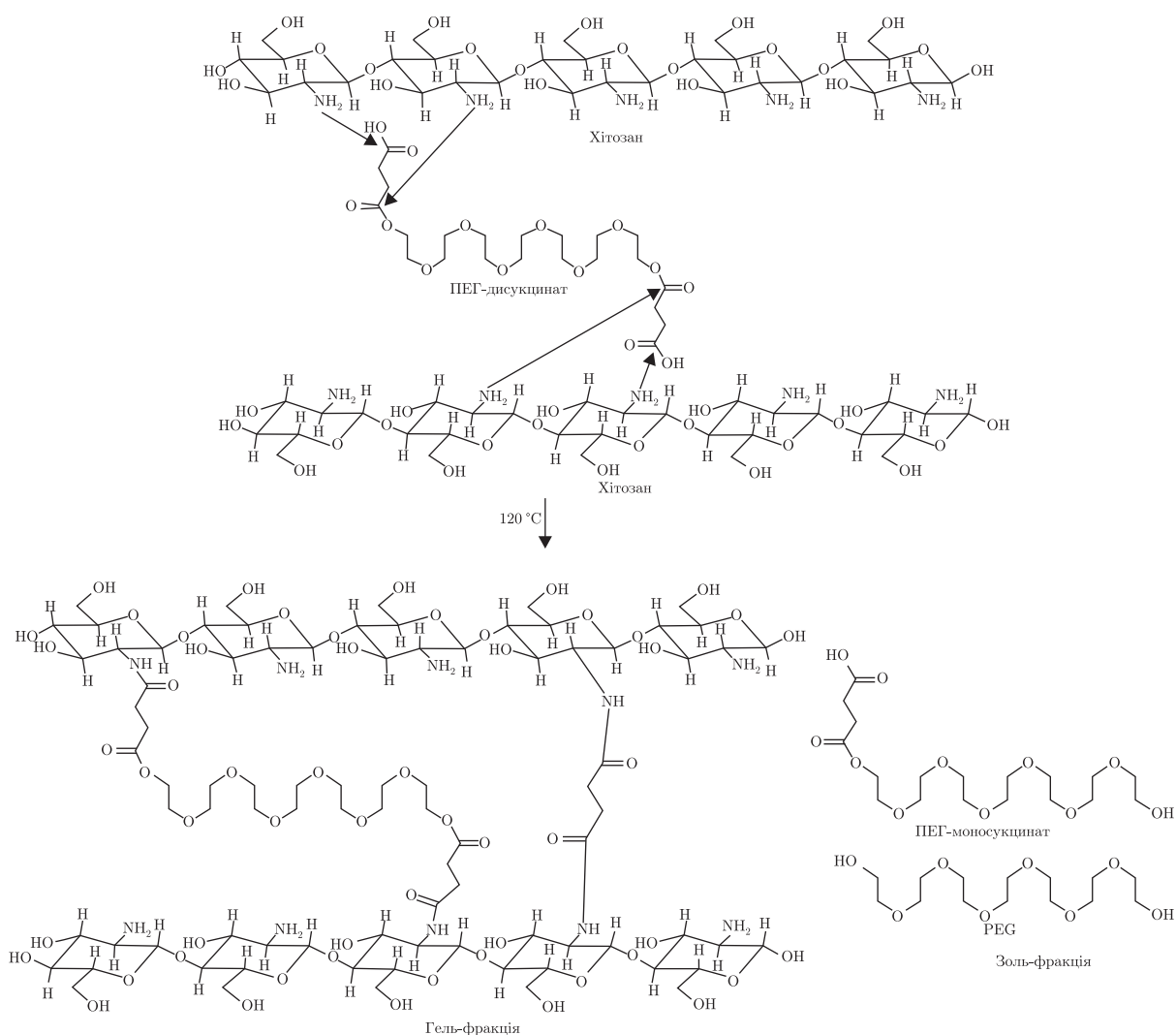
Крім того, беручи до уваги зменшення інтегральної інтенсивності сигналу "D" (див. рис. 3), що відповідає протонам метиленової групи в  $\alpha$ -положенні відносно естерної групи в залишку бурштинової кислоти, яке вказує на перебіг процесів, останні супроводжуються втратою естерних зв'язків ПЕГ-дисукцинату, можна зробити висновок, що амідний зв'язок утворюється за реакцією між естерними групами поліетиленглікольдисукцинату та аміногрупою 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-глюкопіранозиду за схемою:



За допомогою <sup>1</sup>H ЯМР спектроскопії встановлено, що при температурі 120 °С без введення додаткових активаторів функціональних груп і каталізаторів відбувається взаємо-

дія аміногрупи 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозиду, який є моделлю мономерної ланки макромолекули хітозану, з карбоксильною групою 2СК-ПЕГ, що призводить до утворення ковалентного амідного зв'язку.

Дослідження формування гідрогелів на основі хітозану та поліетиленглікольдисукцинатів. Встановлений хімізм утворення ковалентних зв'язків при взаємодії аміногруп 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозиду з карбоксильними та естерними групами поліетиленглікольдисукцинатів надає можливість конструювання полімерного каркасу гідрогелів на основі хітозану. Процес формування гідрогелю передбачає формування ковалентних зв'язків при термообробці за рахунок реакцій взаємодії між карбоксильними групами ПЕГ-дисукцинату та аміногрупами хітозану і реакцій амінолізу за участю естерних груп ПЕГ-дисукцинату та аміногруп хітозану за схемою:



Таким чином, досліджені особливості взаємодії макромолекул хітозану з поліетиленглікольдисукцинатами та визначені закономірності утворення полімерного каркасу гідрогелів з використанням 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкопіранозиду як моделі мономерної ланки хітозану. Синтезовано зшивачі поліетиленглікольдисукцинати з різною довжи-

ною поліетиленгліколевого фрагмента. З використанням модельного моносахариду 1-О-бензил-2-аміно-2-дезоксид-глюкопіранозиду та зшивачів встановлено, що формування полімерного каркасу гідрогелю відбувається за рахунок утворення міжмолекулярних амідних зв'язків одночасно за двома шляхами: через взаємодію аміногруп макромолекул хітозану з карбоксильними групами поліетиленглікольдисукцинатів та через реакцію амінолізу естерних груп зшивачів аміногрупами хітозану.

1. Muzzarelli R. Natural chelating polymers. – Oxford: Pergamon Press, 1973. – P. 144–176.
2. Yao K., Li J., Yao F., Yin Y. Chitosan-based hydrogels. Functions and applications. – Boca Raton: CRC Press, 2012. – 511 p.
3. Peniche C., Argüelles-Monol W., Peniche H., Acosta N. Chitosan: An attractive biocompatible polymer for microencapsulation // Macromol. Biosci. – 2003. – **3**. – P. 511–520.
4. Bhattarai N., Li Z. S., Gunn J. et al. Natural-synthetic polyblend nanofibers for biomedical applications // Adv. Mater. – 2009. – **21**. – P. 2792–2797.
5. Hu Y., Du Y., Yang J. et al. Self-aggregation and antibacterial activity of N-acylated chitosan // Polymer. – 2007. – **48**. – P. 3098–3106.
6. Hu F.-Q., Meng P., Dai Y.-Q. et al. PEGylated chitosan-based polymer micelle as an intracellular delivery carrier for anti-tumor targeting therapy // Eur. J. Pharm. Biopharm. – 2008. – **70**. – P. 749–757.
7. Bian F., Jia L., Yu W., Liu M. Self-assembled micelles of N-phthaloylchitosan-g-polyvinylpyrrolidone for drug delivery // Carbohydr. Polym. – 2009. – **76**. – P. 454–459.
8. Kirschner C. V., Anseth K. S. Hydrogels in healthcare: From static to dynamic material microenvironments // Acta Materialia. – 2013. – **61**. – P. 931–944.
9. Lee K. Y., Mooney D. J. Hydrogels for tissue engineering // Chem. Rev. – 2001. – **101**. – P. 1869–1879.
10. Chen S.-H., Tsao C.-T., Chang C.-H. et al. Synthesis and characterization of reinforced poly(ethylene glycol)/chitosan hydrogel as wound dressing materials // Macromol. Mater. Eng. – 2013. – **298**. – P. 429–438.
11. Mi F.-L., Kuan C.-Y., Shyu S.-S. et al. The study of gelation kinetics and chain relaxation properties of glutaraldehyde-cross-linked chitosan gel and their effects on microspheres preparation and drug release // Biomaterials. – 2000. – **41**. – P. 389–396.
12. Gupta K. C., Jabrail F. H. Glutaraldehyde and glyoxal cross-linked chitosan microspheres for controlled delivery of centchroman // Carbohydr. Res. – 2006. – **341**. – P. 744–756.
13. Welsh E. R., Price R. R. Chitosan cross-linking with a water-soluble, blocked diisocyanate. 2. Solvates and hydrogels // Biomacromolecules. – 2003. – **4**. – P. 1357–1361.

Національний університет “Львівська політехніка”

Надійшло до редакції 26.12.2013

**О. Ю. Жолобко, И. Т. Тарнавчик, А. С. Воронов, О. Г. Будишевская,  
А. М. Когут, С. А. Воронов**

### **Особенности формирования гидрогелей на основе хитозана и полиэтиленгликольдисукцинатов путем термообработки**

*Исследовано при термической обработке взаимодействие полиэтиленгликольдисукцинатов с 1-О-бензил-2-амино-2-дезоксид-глюкопиранозидом (1-бензилглюкозамином), который является моделью мономерного звена макромолекулы хитозана, без использования дополнительных активаторов функциональных групп или катализаторов. Показано, что при этом происходит реакция между аминогруппами 1-бензилглюкозамина и карбоксильными группами полиэтиленгликольдисукцинатов с образованием ковалентных амидных связей. Одновременно протекает также реакция аминолита сложноэфирных связей полиэтиленгликольдисукцинатов под действием аминогрупп 1-бензилглюкозамина, в результате которой так-*



же образуются межмолекулярные амидные связи. Синтезированы новые биосовместимые ковалентно сшитые гидрогели на основе хитозана и полиэтиленгликольдисукцинатов, полимерный каркас которых формируется по этим реакциям. Свойства новых гидрогелей, в частности набухание, способность к солубилизации лекарств, физико-механические характеристики могут контролироваться в широких пределах изменением концентрации полимеров, соотношения функциональных групп  $\text{COOH} : \text{NH}_2$  и длины полиэтиленгликолевой цепи.

**O. Yu. Zholobko, I. T. Tarnavchuk, A. S. Voronov, O. G. Budishevskaya,  
A. M. Kohut, S. A. Voronov**

### **Peculiarities of the development of hydrogels based on chitosan and poly(ethylene glycol) disuccinate at elevated temperature**

*The reaction of poly(ethylene glycol) disuccinates and 1-O-benzyl-2-amino-2-deoxy-D-glucopyranoside (1-benzylglucosamine), which resembles a repeating unit in a chitosan macromolecule, has been studied at an elevated temperature without additional activating agents and catalysts. The obtained results indicate that the interaction between the amino groups of 1-benzylglucosamine and the carboxylic groups of poly(ethylene glycol) disuccinates has led to the formation of covalent amide bonds. Simultaneously, the aminolysis reaction occurs as a result of the interaction between the ester groups of poly(ethylene glycol) disuccinates and the amino groups of chitosan, forming intermolecular amide bonds as well. New covalently cross-linked biocompatible hydrogels based on chitosan and poly(ethylene glycol) disuccinates have been synthesized. The polymeric scaffold of the hydrogels is formed through these reactions. The hydrogel properties (e. g., swelling, drug solubilization, and mechanical properties) could be controlled through the reagents concentration, as well as through the  $\text{COOH}/\text{NH}_2$  functional group ratio and the poly(ethylene glycol) chain length.*



УДК 57.044:[616.006+612.35+612.36]

Г. М. Кузнєцова, О. В. Линчак, С. В. Яблонська,  
О. М. Бахуринська, М. О. Данилов, А. В. Бичко,  
В. К. Рибальченко

### Властивості похідних піролу як потенційних протипухлинних сполук нового покоління

*(Представлено членом-кореспондентом НАН України М. Ю. Євтушенком)*

*Досліджено вплив похідних піролу 5-аміно-4-(1,3-бензотіазол-2-іл)-1-(3-метоксифеніл)-1,2-дигідро-3Н-пірол-3-ону і 1-(4-СІ-бензил)-3-СІ-4-(СF<sub>3</sub>-феніламіно)-1Н-пірол-2,5-діону на кишечник та печінку щурів за умов індукованого 1,2-диметилгідразином раку товстої кишки. Показано, що дані сполуки є малотоксичними, виявляють протипухлинну активність, мають антиоксидантні та мембранотропні властивості.*

Колоректальний рак посідає чільне місце серед видів злоякісних пухлин шлунково-кишкового тракту і друге місце за смертністю людей від злоякісних новоутворень у світі [1]. Протипухлинні препарати, що застосовуються для лікування цієї патології, характеризуються високою частотою розвитку і тяжкістю побічних ефектів, зокрема на шлунково-кишковому тракті, що негативно впливає на ефективність лікування [2]. Відомо, що таргетні інгібітори проліферативної активності — інгібітори протеїнкіназ, є високоефективними та малотоксичними протипухлинними агентами [3]. У терапії колоректального раку використовуються препарати даного класу, які є моноклональними антитілами до рецепторів епідермального та ендотеліального фактора росту судин [4]. Низькомолекулярні таргетні препарати, які б застосовувалися для лікування цієї патології, відсутні.

Перспективними сполуками у цьому плані є похідні дигідропіролу та малеїміду, синтезовані Науково-виробничим хіміко-біологічним центром Київського національного університету імені Тараса Шевченка методом *in silico* дизайну як таргетні інгібітори протеїнкіназ [5]. Тестуванням даних сполук на клітинних лініях, зокрема на лініях НСТ-15 та СОЛО-205 (колоректальний рак людини), було встановлено найвищу цитостатичну активність сполук 5-аміно-4-(1,3-бензотіазол-2-іл)-1-(3-метоксифеніл)-1,2-дигідро-3Н-пірол-3-ону (Д1) і 1-(4-СІ-бензил)-3-СІ-4-(СF<sub>3</sub>-феніламіно)-1Н-пірол-2,5-діону (МІ1) (рис. 1) [5, 6]. То-

© Г. М. Кузнєцова, О. В. Линчак, С. В. Яблонська, О. М. Бахуринська, М. О. Данилов, А. В. Бичко,  
В. К. Рибальченко, 2014

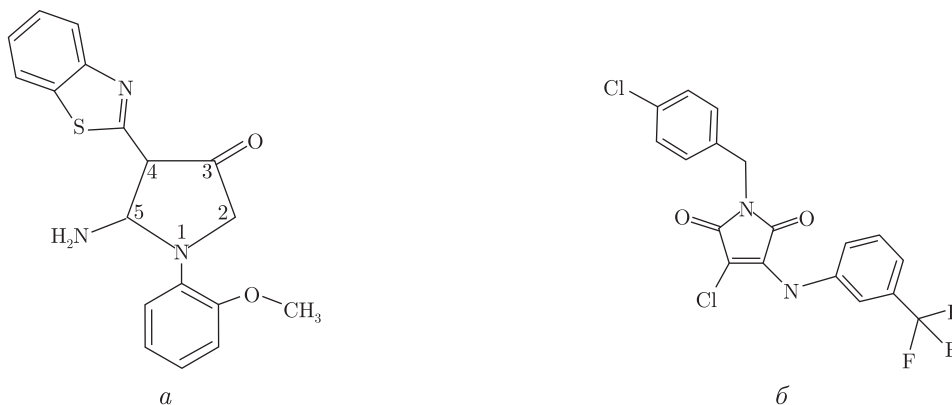


Рис. 1. Структурні формули похідних піролу: *a* — 5-аміно-4-(1,3-бензотіазол-2-іл)-1-(3-метоксифеніл)-1,2-дигідро-3Н-пірол-3-он (Д1); *б* — 1-(4-Сl-бензил)-3-Сl-4-(СF<sub>3</sub>-феніламіно)-1Н-пірол-2,5-діон (МІ1)

му метою дослідження було дати оцінку похідним піролу Д1 та МІ1 як протипухлинним сполукам на основі вивчення *in vivo* їх ефективності на моделі раку товстої кишки та токсичності на органи шлунково-кишкового тракту порівняно з традиційним цитостатиком 5-фторурацилом.

Протипухлинну активність МІ1 та Д1 (2,7 та 2,3 мг/кг маси тіла відповідно per os щоденно протягом 27 тижнів) досліджували на моделі індукованого 1,2-диметилгідразинном (ДМГ, 20 мг/кг маси тіла підшкірно щотижнево протягом 20 тижнів) колоректального раку щурів, що є адекватною імітацією колоректального раку людини [7]. Визначали кількість пухлин та загальну площу пухлинного ураження [8]. Вплив похідних піролу на нормальні тканини кишечника та печінки щурів вивчали за допомогою гістологічних та біохімічних методів: оцінювали мікропрепарати печінки, тонкої та товстої кишок щурів, забарвлені гематоксилін-еозин-оранжем, проводили морфометричні дослідження [9], визначали активність ферментів-маркерів стану печінки і вміст білірубину в сироватці крові [10]. Антиоксидантну активність МІ1 та Д1 досліджували на щурах на моделях індукованого СоСl<sub>2</sub> (13 мг/кг маси тіла інтраперитонеально щоденно протягом 10 днів) оксидативного стресу [11] і ДМГ-індукованого канцерогенезу [7]. Визначали вміст тіобарбітуратактивних продуктів, карбонільних груп білків у фракції плазматичних мембран печінки, активність супероксиддисмутази та каталази у фракції цитозолу печінки [10], вміст 8-гідроксидезоксигуанозину (8-охоG) в сечі [12]. На гістологічних мікропрепаратах [9] оцінювали стан судинного русла і рівень запального процесу в печінці та слизовій оболонці кишечника. Мембранотропну активність досліджували за допомогою методу інфрачервоної (ІЧ) спектроскопії сухих плівок [13] і методу нестационарних циклічних вольтамперних характеристик біомолекулярних ліпідних мембран [14].

Досліджувані похідні піролу при дії протягом 27 тижнів не пошкоджували тканини кишечника та печінки щурів і не спричиняли значних змін біохімічних показників їх стану. Встановлено, що загальна площа пухлинного ураження при ДМГ-індукованому канцерогенезі товстого кишечника у разі дії Д1 та МІ1 протягом 27 тижнів зменшувалася на 46 і 60% відповідно, тоді як для 5-фторурацилу цей показник не перевищував 43%. При аналізі впливу досліджуваних сполук на прилеглі до колоректальних пухлин тканини кишечника та печінки щурів було показано протекторний вплив Д1 та МІ1 проти уражень, спричинених канцерогеном: зменшення рівня запалення, мікрovasкулярних порушень, відновлення

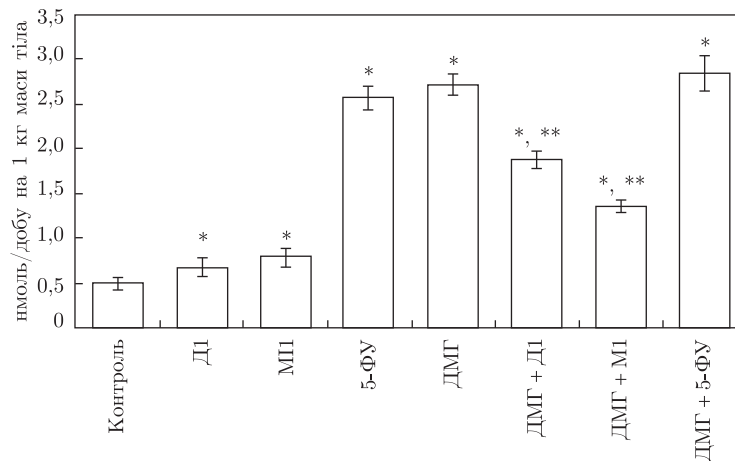


Рис. 2. Швидкість екскреції 8-гідроксидезоксигуанозину (8-охоG) у щурів при дії Д1, МП1 та 5-фторурацилу (5-ФУ) окремо і на 27-й тиждень індукованого 1,2-диметилгідразином канцерогенезу. \* $p < 0,05$  порівняно з контролем, \*\* $p < 0,05$  порівняно з групою ДМГ

морфофункціонального стану слизової оболонки кишечника та морфологічних і біохімічних показників стану печінки. Натомість при дії 5-фторурацилу негативні зміни поглиблювалися.

Одним з механізмів канцерогенної дії ДМГ є індукція вільнорадикального окиснення [7]. Встановлено, що МП1 та Д1 зменшували рівень 8-охоG в сечі, що є одним з головних біохімічних маркерів окисних пошкоджень ДНК, у тому числі при канцерогенезі, на 21 та 50% відповідно (рис. 2), а також сприяли наближенню до норми активності антиоксидантних ферментів (супероксиддисмутази та каталази у фракції цитозолу печінки) та інтенсивності перекисного окиснення ліпідів (за концентраціями тіобарбітуратактивних продуктів та карбонільних груп білків у фракції плазматичних мембран печінки). При дослідженні ефектів Д1 та МП1 на моделі  $\text{CoCl}_2$ -індукованого оксидативного стресу вищезазначені параметри також наближалися до норми. При оцінці загального стану тканин кишечника та печінки за умов оксидативного стресу було показано зменшення рівня запалення та наближення до норми морфофункціонального стану цих органів при впливі обох сполук.

При вивченні мембранотропної активності Д1 та МП1 було досліджено їх вплив на питому провідність та питому електричну ємність штучної біліпідної мембрани, сформованої з азолектину. Виявлено концентраційно залежне експоненційне зростання провідності та ємності мембрани, модифікованої МП1, і куполоподібну зміну провідності без вірогідної зміни ємності мембрани, модифікованої Д1 (рис. 3). При дослідженні сухих плівок фосфатидилхоліну, модифікованих Д1 та МП1, спостерігалися зміни інтенсивності ІЧ-поглинання гідрофільних атомарних груп ліпиду (карбоксильних та аміногруп) у випадку дії обох сполук і гідрофобних атомарних груп ( $-\text{CH}=\text{}$  і  $-\text{CH}_2-$ ) у випадку дії лише МП1 (рис. 4). На основі цих даних було висунуто припущення про те, що Д1 адсорбується на поверхні мембрани, а МП1, навпаки, інкорпорує в мембрану, викликаючи структурні дефекти в упаковці молекул ліпідів, що призводить до локального зменшення товщини ліпідного бішару та збільшення його проникності. Отримані дані можуть слугувати підґрунтям для припущення про “ліпідний” шлях взаємодії вказаних сполук з плазматичною мембраною (як це раніше було встановлено для регуляторних пептидів [15]) і модифікацію протеїнкіназної активності клітин.

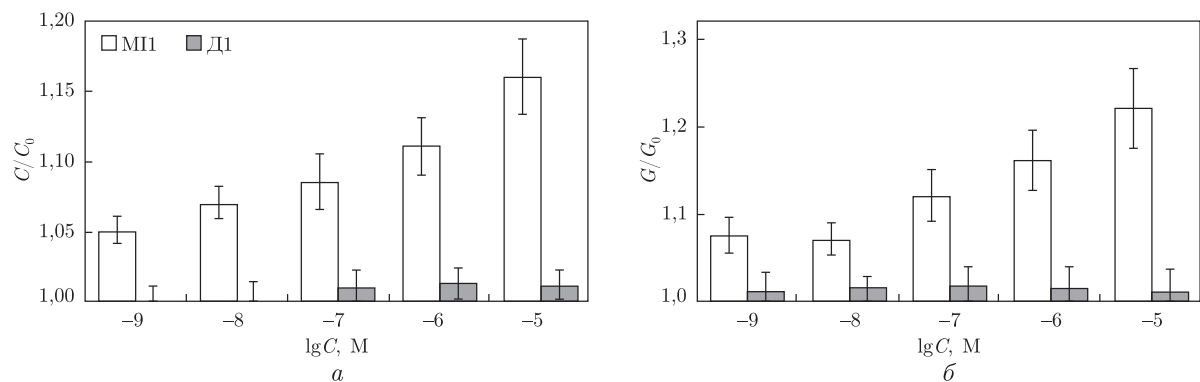


Рис. 3. Концентраційна залежність відносних змін питомої електричної ємності ( $C/C_0$ ) (а) і питомої провідності ( $G/G_0$ ) (б) біліпідних мембран, сформованих з азолектину, при модифікації їх МІ1 та Д1 у концентраціях  $10^{-9}$ – $10^{-5}$  М.  $G_0$  і  $C_0$  — питома провідність та електрична ємність немодифікованих мембран

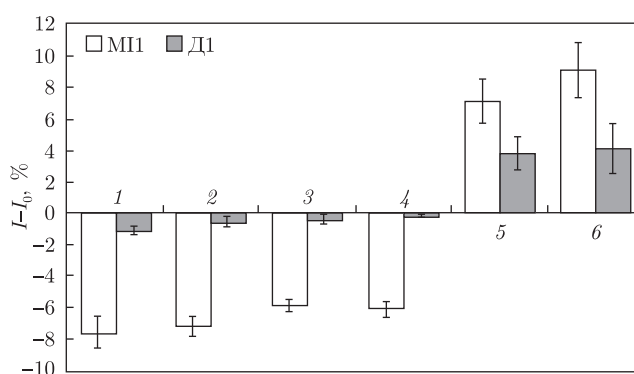


Рис. 4. Відносна зміна інтенсивності ІЧ-поглинання атомарними групами молекул фосфатидилхоліну в сухих плівках ліпиду, модифікованих МІ1 та Д1 у концентрації  $10^{-5}$  М. 1 — валентні симетричні коливання груп  $-\text{CH}=\text{}$  ( $\nu = 3420 \text{ cm}^{-1}$ ); 2 — валентні асиметричні коливання груп  $-\text{CH}=\text{}$  ( $\nu = 3480 \text{ cm}^{-1}$ ); 3 — валентні симетричні коливання груп  $-\text{CH}_2-$  ( $\nu = 3360 \text{ cm}^{-1}$ ); 4 — валентні асиметричні коливання груп  $-\text{CH}_2-$  ( $\nu = 3270 \text{ cm}^{-1}$ ); 5 — валентні симетричні коливання груп  $-\text{COO}-$  ( $\nu = 1875 \text{ cm}^{-1}$ ); 6 — валентні асиметричні коливання груп  $-\text{NH}_3^+$  ( $\nu = 1560 \text{ cm}^{-1}$ );  $I_0$  — інтенсивність ІЧ-поглинання вказаних груп в сухих плівках фосфатидилхоліну (контроль)

Таким чином, Д1 та МІ1 є малотоксичними порівняно з 5-фторурацилом, ефективними при колоректальному раку протипухлинними сполуками, перспективними для подальших передклінічних досліджень, антиканцерогенна дія яких може бути реалізована завдяки їх мембранотропним і антиоксидантним властивостям.

1. Bray F., Jemal A., Grey N. et al. Global cancer transitions according to the Human Development Index (2008–2030): a population-based study // *Lancet Oncol.* – 2012. – **13**. – P. 790–801.
2. Телетаєва Г. М. Профилактика и лечение желудочно-кишечных осложнений лекарственной терапии (тошнота и рвота, мукозиты, диарея) // *Практич. онкология.* – 2009. – **10**, № 3. – С. 158–167.
3. Singer C. F. Principles and method of action of targeted therapies // *Wien. Med. Wochenschr.* – 2010. – **160**, No 19–20. – P. 501–505.
4. Трякин А. А. Таргетная терапия колоректального рака, рака желудка и поджелудочной железы // *Практич. онкология.* – 2010. – **11**. – С. 143–150.
5. Пат. 22204 Україна, МПК А61К 31/40. Сполука 1,4-заміщених 5-аміно-1,2-дигідропірол-3-онів, що має протиракову активність / Г. Г. Дубініна, Ю. М. Воловенко. – Опубл. 25.04.2007, Бюл. № 5.

6. Гарманчук Л. В., Сенчило Н. В., Ніжуліна В. В. та ін. Цитотоксичний вплив на пухлинні клітини *in vitro* агентів з протипухлинним та антиметастатичним ефектом // Фізика живого. – 2011. – **19**, № 2. – С. 51–53.
7. Perse M., Cerar A. The dimethylhydrazine induced colorectal tumours in rat-experimental colorectal carcinogenesis // *Radiol. Oncol.* – 2005. – **39**, No 1. – P. 61–70.
8. Pozharisski K. N. Pathology of tumours in laboratory animals. Tumours of the rat. Tumours of the intestines // *IARC Sci. Publ.* – 1990. – **99**. – P. 159–198.
9. Горальський Л. П., Хомич В. Т., Кононський О. І. Основи гістологічної техніки і морфофункціональні методи досліджень у нормі та при патології. Навчальний посібник. – Житомир: Полісся, 2005. – 288 с.
10. Яблонська С. В., Філінська О. М., Островська Г. В., Рыбальченко В. К. Оцінка гепатотоксичності нового похідного малеїміду з цитостатичною активністю і його вплив на пероксидне окислення та антиоксидантну систему печінки // *Укр. біохім. журн.* – 2009. – **81**, № 5. – С. 83–92.
11. Калиман П. А., Охрименко С. М. Цикл глюкоза–жирные кислоты при оксидативном стрессе у крыс, вызванном хлоридом кобальта // *Там само.* – 2005. – **77**, № 2. – С. 154–158.
12. Бурлака А. П., Сидорик Є. П. Радикальні форми кисню та оксиду азоту при пухлинному процесі. – Київ: Наук. думка, 2006. – 228 с.
13. Шрайнер Р., Фьюзон Р., Кертин Д. Идентификация органических соединений. – Москва: Наука, 1983. – 704 с.
14. Омельченко А. М., Бовыкин Б. А., Сытник Т. В. Измерение емкости бислоиных липидных мембран методом нестационарных циклических вольт-амперных характеристик // *Мол. генетика и биофизика.* – 1990. – **15**. – С. 17.
15. Островська Г. В. Первинні механізми мембраномодуючої дії біорегуляторів природного і синтетичного походження: Автореф. дис. ... д-ра біол. наук: 03.00.02. – Київ, 2005. – 44 с.

Навчально-науковий центр “Інститут біології”  
Київського національного університету  
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 01.10.2013

**Г. Н. Кузнецова, О. В. Линчак, С. В. Яблонская, Е. М. Бахуринская,  
М. А. Данилов, А. В. Бычко, В. К. Рыбальченко**

### **Свойства производных пиррола как потенциальных противоопухолевых соединений нового поколения**

*Исследовано влияние производных пиррола 5-амино-4-(1,3-бензотиазол-2-ил)-1-(3-метокси-фенил)-1,2-дигидро-3Н-пиррол-3-она и 1-(4-Cl-бензил)-3-Cl-4-(CF<sub>3</sub>-фениламино)-1Н-пиррол-2,5-диона на кишечник и печень крыс в условиях индуцированного 1,2-диметилгидразином рака толстого кишечника. Показано, что данные соединения являются малотоксичными, проявляют противоопухолевую активность, имеют антиоксидантные и мембранотропные свойства.*

**Н. М. Kuznietsova, O. V. Lynchak, S. V. Yablonska, O. M. Bachurynska,  
M. O. Danylov, A. V. Bychko, V. K. Rybalchenko**

### **Properties of pyrrol derivatives as potential anticancer compounds of a new generation**

*The effects of pyrrol derivatives 5-amino-4-(1,3-benzothiazol-2-yl)-1-(3-methoxyphenyl)-1,2-dihydro-3H-pyrrol-3-one and 1-(4-Cl-benzyl)-3-Cl-4-(CF<sub>3</sub>-phenylamino)-1H-pyrrol-2,5-dione on rat intestine and liver under 1,2-dimethylhydrazine-induced colon cancer are investigated. Low toxicity, antitumor activity, antioxidant and membranotropic properties of these compounds are observed.*

Ю. О. Тинкевич, Р. А. Волков

**Новий структурний клас 5S рДНК *Rosa wichurana* Среп.**

(Представлено членом-кореспондентом НАН України В. А. Кунахом)

Ділянки геному, що кодують 5S рРНК (5S рДНК), присутні у всіх еукаріотичних організмів і являють собою привабливу модель для дослідження механізмів молекулярної еволюції тандемно організованих повторюваних послідовностей у різних таксономічних групах. З метою з'ясування особливостей молекулярної еволюції 5S рДНК у роді *Rosa* кілька повторюваних одиниць рДНК диплоїдного виду *R. wichurana* (секція *Synstylae*) було клоновано, секвеновано та порівняно з рДНК інших диплоїдів: *R. nitida* (секція *Carolinae*), *R. rugosa* (секція *Cinnamomeae*), *R. sericea* (секція *Pimpinellifoliae*). Показано, що в геномі *R. wichurana* наявний лише один варіант 5S рДНК, який містить інтактні елементи промотору в міжгенному спейсері (МГС) та, імовірно, є транскрипційно активним. Неочікувано низький рівень подібності (від 52,8 до 57,6%) між послідовностями МГС *R. wichurana* та трьох інших диплоїдних видів свідчить про те, що для представників секції *Synstylae* є характерним новий структурний варіант 5S рДНК і вказує на прискорений темп молекулярної еволюції рДНК у цій секції.

Гени 5S рДНК належать до середньоповторюваних тандемно організованих послідовностей. Вони локалізовані на хромосомах в окремих кластерах, кількість яких становить від 1 до 3 на хромосомний набір. Повторювана одиниця (повтор) 5S рДНК складається з кодуючої ділянки і міжгенного спейсера (МГС). Кодуюча ділянка є еволюційно консервативною, і помітна різниця в її послідовності спостерігається лише при порівнянні віддалених таксонів. Натомість, послідовність МГС швидко накопичує мутації і нерідко значно відрізняється вже на міжвидовому або міжпопуляційному рівні [1].

Нуклеотидні послідовності МГС окремих повторів, які складають один кластер, зазвичай високогомологічні, що є наслідком “вирівнювання” різниці між ними, або гомогенізації. Цей феномен є характерною рисою концертної еволюції, притаманної більшості повторюваних послідовностей [2]. Проте повтори 5S рДНК із різних кластерів гомогенізують набагато гірше, що справедливо, зокрема, і для кластерів алополіплоїдних форм, які походять від різних батьківських видів [1, 3]. Сукупність рис організації 5S рДНК робить її зручною моделлю для вивчення молекулярної еволюції повторюваних послідовностей в різних групах організмів.

Раніше в нашій лабораторії були проведені дослідження організації 5S рДНК трьох диплоїдних представників роду *Rosa* — *R. nitida* Willd, *R. sericea* Lindl. та *R. rugosa* Thunb, які належать до різних секцій цього великого та складного в таксономічному відношенні роду [4–6]. Для проаналізованих видів був зафіксований значний рівень гомології послідовностей МГС, що вказує на їх високу спорідненість та нещодавній за геологічними мірками час дивергенції цих видів. Тому для подальших досліджень з метою аналізу закономірностей еволюції 5S рДНК у таксонів, що знаходяться на більш значних філогенетичних дистанціях, був обраний далекосхідний диплоїдний вид — *R. wichurana* Среп, що представляє більш віддалену секцію роду *Rosa* — *Synstylae* [7].

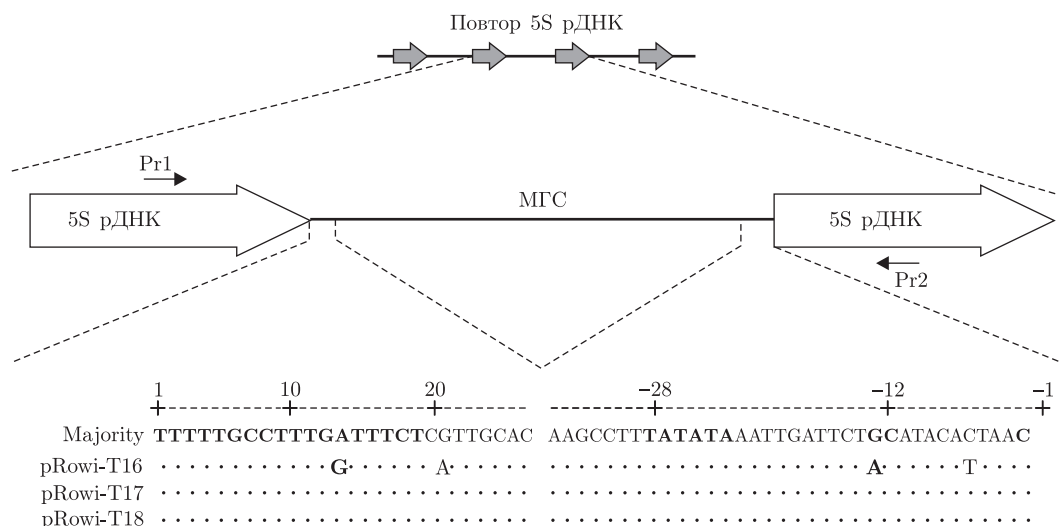


Рис. 1. Структурна організація 5S рДНК *Rosa wichurana*. Наведено фрагменти вирівнювання нуклеотидних послідовностей МГС, що містять регуляторні елементи. Стрілками вказано розташування праймерів Pr1 та Pr2. Напівжирним шрифтом виділено мотиви зовнішніх регуляторних елементів промотору та термінатор

**Матеріали та методи.** Матеріалом для дослідження був зразок *R. wichurana*, наданий ботанічним садом Чернівецького національного університету. Загальну ДНК екстрагували згідно зі стандартним протоколом [8, 9].

Повторювану одиницю 5S рДНК ампліфікували методом полімеразної ланцюгової реакції (ПЛР), отримані ампліфікати клонували в плазмідний вектор pLitmus 38i як було описано раніше [1, 4]. Застосовані для ПЛР праймери забезпечують ампліфікацію повного МГС та фланкуючих ділянок кодуючої послідовності (рис. 1).

Рекомбінантні плазмідні, що містили інсerti 5S рДНК, сиквенували з використанням Big Due Terminator Cycle Sequencing Kit на сиквенаторі ABI Prism 310 (PE Applied Biosystems, США). Первинну обробку отриманої нуклеотидної послідовності проводили за допомогою пакета програм комп'ютерної обробки даних DNASTAR. Вирівнювання послідовностей здійснювали методом Clustal V.

**Результати та їх обговорення.** Загалом було отримано п'ять клонів рекомбінантних плазмід, що містили інсerti 5S рДНК *R. wichurana*. Рестриктазний аналіз цих плазмід показав, що обробка *Eco52* I призводить до утворення двох фрагментів ДНК різного розміру. Високомолекулярний фрагмент мав довжину приблизно 2800–2900 н. п., що відповідає розміру лінійної форми вектора pLitmus 38i. Фрагмент меншого розміру мав довжину приблизно 530 н. п., що відповідає розміру ампліфікатів 5S рДНК *R. wichurana*.

Для інсертів із трьох клонів було визначено нуклеотидну послідовність. Довжина клонуваних повторюваних ділянок 5S рДНК *R. wichurana* становила 535 н. п. для клону pRowi-T16, 524 н. п. для pRowi-T17 та 537 н. п. для pRowi-T18. Такі розміри повторів є типовими для представників роду *Rosa* [4–6].

Аналіз отриманих послідовностей показав, що всі три клони містять послідовність МГС, фланковану з обох сторін фрагментами кодуючої ділянки 5S рДНК. Безпосередньо з полілінкерними частинами вектора межують послідовності праймерів, використаних при проведенні ПЛР. За результатами визначення меж кодуючої ділянки встановлено розміри МГС для клонів pRowi-T16, pRowi-T17 та pRowi-T18 — 423, 412 та 425 н. п. відповідно.



Вирівнювання отриманих нуклеотидних послідовностей показало практично повну ідентичність кодуючих ділянок як між клонами *R. wichurana*, так і порівняно з іншими представниками роду. На противагу цьому, в МГС було знайдено значну кількість одно- та багатонуклеотидних інсерцій/делецій та точкових нуклеотидних замін, що відрізняє МГС *R. wichurana* від МГС досліджених раніше видів *Rosa*.

За результатами вирівнювання нуклеотидних послідовностей був встановлений рівень подібності між МГС досліджених клонів (табл. 1). Цей показник для різних клонів *R. wichurana* становить від 91,7 до 95,4%. Такий рівень внутрішньогеномної гомології послідовностей МГС є помітно нижчим за аналогічні показники для *R. rugosa* (99,1%) та *R. nitida* (від 97,9 до 99,5%).

Проте найбільшою несподіванкою виявився низький рівень гомології між МГС *R. wichurana* та інших трьох видів роду *Rosa*, що становить від 52,8 до 57,6%. Такі низькі значення гомології при порівнянні МГС видів, що належать до одного роду, раніше не спостерігались. Так, наприклад, рівень подібності між нуклеотидними послідовностями МГС 5S рДНК різних видів всередині родів *Nicotiana* та *Astragalus* є вищим за 80 та 70% відповідно [3, 10].

Причиною низького рівня подібності клонованих повторів 5S рДНК *R. wichurana* та підвищеної кількості мутацій в їх МГС, порівняно з повторами з геномів інших видів *Rosa*, могло б бути їх перетворення в нефункціонуючі псевдогени [11]. Для перевірки цього припущення ми вважали доцільним визначити, чи в МГС отриманих клонів присутні мотиви, необхідні для ініціації транскрипції.

Було встановлено, що в МГС всіх клонів 5S рДНК *R. wichurana* присутні сигнали, що відповідають зовнішнім регуляторним елементам промотору РНК-полімерази III, характерним для 5S рДНК [12]. До таких сигналів належить шестинуклеотидний мотив ТАТАТА, розміщений на 3' кінці МГС в позиції –28 н. п. від 5' кінця кодуючої ділянки, а також мотиви GC та C в позиціях –12 н. п. та –1 н. п. відповідно (див. рис. 1). Із трьох досліджених клонів лише у pRowi-T16 виявлена нуклеотидна заміна в мотиві GC. Також безпосередньо після 3' кінця кодуючої ділянки розташована оліго-Т послідовність, що виконує функцію термінатора транскрипції РНК-полімерази III [12]. Таким чином, у МГС 5S рДНК *R. wichurana* виявлено всі типові транскрипційно важливі мотиви (див. рис. 1).

Наявність у МГС усіх регуляторних елементів транскрипції разом з відсутністю мутацій у кодуючій ділянці 5S рДНК *R. wichurana* суперечить припущенню про переродження цих

Таблиця 1. Рівень подібності (%) МГС 5S рДНК представників роду *Rosa*

1	2	3	4	5	6	7	8	9	№ клону
100	98,3	96,3	97,5	96,3	96,2	44,4	43,8	38,3	1
	100	96,3	97,5	96,3	96,2	44,2	43,3	43,5	2
		100	99,5	99,5	92,9	42,0	40,3	40,3	3
			100	99,5	93,4	41,6	40,1	40,6	4
				100	92,9	42,0	40,3	40,3	5
					100	44,0	43,5	43,0	6
						100	92,6	92,8	7
							100	97,0	8
								100	9

Примітка. Для порівняння було використано послідовності МГС 5S рДНК *R. rugosa* (1 – pRoru-T1; 2 – pRoru-T54 [6]); *R. nitida* (3 – pRoni-T30; 4 – pRoni-T32; 5 – pRoni-T33 [4]); *R. sericea* (6 – pRoser-T53 [5]) та *R. wichurana* (7 – pRowi-T16; 8 – pRowi-T17; 9 – pRowi-T18).

	→	→	→	→
<i>Rosa wichurana</i>	TTGGCC	TTGGGCC	TTGGGGCTC	TTGGGCTTG
<i>Rosa nitida</i>	.....	-----	.....	.....
<i>Rosa rugosa</i>	.....	.....	.....	.....
<i>Rosa sericea</i>	.....	.....	.....	.....A.....
<i>Acaena cylindristachya</i>	.G....	.....	.....	.....
<i>Acaena latebrosa</i>	.G....	-----	.....	.G.....
<i>Cliffortia arborea</i>	.G....	-----	.....	.....
<i>Cliffortia montana</i>	.G...G	-----	.....	.....
<i>Sanguisorba officinalis</i>	.A....	-----	.....	.....

Рис. 2. Порівняння первинної нуклеотидної послідовності зони субповторів у центральній частині МГС 5S рДНК представників роду *Rosa* та підроддини *Rosoideae*. GenBank Acc. Nos: *Acaena cylindristachya* (EU931697); *Acaena latebrosa* (EU931698); *Cliffortia arborea* (EU931700); *Cliffortia graminea* (EU931711); *Sanguisorba officinalis* (EU931696.1)

послідовностей у псевдогени. Отже, можна стверджувати, що нами ідентифікований новий, імовірно, більш рідкісний, функціонально активний клас повторів 5S рДНК, притаманний деяким видам роду *Rosa*. Низький рівень подібності з МГС інших представників роду вказує на стрибкоподібний характер еволюції 5S рДНК шляхом швидких структурних перебудов у минулому.

Подальший аналіз особливостей організації МГС *R. wichurana* дав можливість виявити в його складі дві ділянки підвищеної подібності до МГС інших видів *Rosa*. Одна з цих ділянок містить згадані вище регуляторні елементи РНК-полімерази III, а інша локалізується в центральній частині МГС і складається із чотирьох коротких субповторів (рис. 2). Ця еволюційно консервативна ділянка була раніше знайдена нами в інших видів *Rosa* та в деяких представників підроддини *Rosoideae* [6].

Можливим механізмом виникнення субповторів, аналогічних тим, що знаходяться в центральній консервативній ділянці МГС, вважається “проковзування нитки” ДНК під час реплікації [13]. Теоретично поява невеликої ділянки субповторів може статися протягом кількох клітинних циклів, тобто за дуже короткий за еволюційними масштабами час. Ідентичні при виникненні субповтори в подальшому накопичують мутації зі швидкістю, характерною для ділянки ДНК, в якій вони локалізовані [14]. Наявність ідентичних мутацій у зоні субповторів у представників підроддини *Rosoideae* показує, що ця зона деякий час еволюціонувала за типовою моделлю, але з часом зазнала консервації в спільного предка всієї групи. Така еволюційна подія виглядає несподіваною, адже для центральної частини МГС, в якій локалізована зона субповторів, невідомі регуляторні або будь-які інші функції. Отже, мутації в ній повинні мати нейтральний характер і не елімінуватися добром. Розуміння механізмів і причин еволюційної консервації зони субповторів у МГС потребує подальших досліджень із використанням даних для більшої кількості представників підроддини *Rosoidea* та проведенням порівняння з еволюцією МГС 5S рДНК в інших групах вищих рослин.

1. Volkov R. A., Zanke C., Panchuk I. I., Hemleben V. Molecular evolution of 5S rDNA of *Solanum* species (sect. *Petota*): application for molecular phylogeny and breeding // Theor. Appl. Genet. – 2001. – **103**. – P. 1273–1282.
2. Coen E. S., Thoday J. M., Dover G. Rate of turnover of structural variants in the rDNA gene family of *Drosophila melanogaster* // Nature. – 1982. – **295**, No 5850. – P. 564–568.
3. Fulnecek J., Lim K. Y., Leitch A. R. et al. Evolution and structure of 5S rDNA loci in allotetraploid *Nicotiana tabacum* and its putative parental species // Heredity. – 2002. – **88**. – P. 19–25.
4. Тинкевич Ю. О., Волков Р. А. Структурна організація 5S рибосомальної ДНК *Rosa nitida* Wild. // Вісн. Укр. тов-ва генетиків і селекціонерів. – 2011. – **9**, № 2. – С. 276–282.

5. Тынкевич Ю. О., Волков Р. А. Структурна організація повторюваної ділянки 5S рДНК *Rosa sericea* Lindl. // Біол. системи. – 2011. – **3**, № 4. – С. 315–321.
6. Тынкевич Ю. О., Волков Р. А. Structural organization of 5S ribosomal DNA of *Rosa rugosa* // Cytol. Genet. – 2014. – **48**, No 1. – P. 3–9.
7. Wisseman V., Ritz C. M. The genus *Rosa* (Rosoidae, Rosaceae) revisited: molecular analysis of nr ITR-I and atp B – rbcL intergenic spacer (IGS) versus conventional taxonomy // Botan J. Linn. Soc. – 2005. – **147**. – P. 275–290.
8. Rogers S. O., Bendich A. J. Extraction of DNA from milligram amounts of fresh, herbarium and mummified plant tissues // Plant Mol. Biol. – 1985. – **5**. – P. 69–76.
9. Sambrook J., Fritsch E., Maniatis T. Molecular cloning. – New York: Cold Spring Harbor Laboratory, 1989. – Vol. 1–3.
10. Ma X. Q., Duan J. A., Zhu D. Y. et al. Species identification of Radix Astragali (Huangqi) by DNA sequence of its 5S-rRNA spacer domain // Phytochem. – 2000. – **54**. – P. 363–368.
11. Takahata N., Kimura M. A model of evolutionary base substitutions and its application with special reference to rapid change of pseudogenes // Genetics. – 1981. – **98**. – P. 641–657.
12. Douet J., Tourmente S. Transcription of the 5S rRNA heterochromatic genes is epigenetically controlled in *Arabidopsis thaliana* and *Xenopus laevis* // Heredity. – 2007. – **99**. – P. 5–13.
13. Christian S., Diethard T. Slippage synthesis of simple sequence DNA // Nucl. Acid. Res. – 1992. – **20**, No 2. – P. 211–215.
14. Kruglyak S., Durrett R. T., Schug M. D., Aquadro C. F. Equilibrium distributions of microsatellite repeat length resulting from a balance between slippage events and point mutations // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 1998. – **95**. – P. 10774–10778.

Чернівецький національний університет  
ім. Юрія Федьковича

Надійшло до редакції 01.10.2013

**Ю. О. Тынкевич, Р. А. Волков**

### **Новый структурный клас 5S рДНК *Rosa wichurana* Среп.**

Участки генома, кодирующие 5S рРНК (5S рДНК), присутствуют во всех эукариотических организмах и представляют собой интересную модель для исследования механизмов молекулярной эволюции тандемно организованных повторяющихся последовательностей в различных таксономических группах. С целью уточнения особенностей молекулярной эволюции 5S рДНК в роде *Rosa* несколько повторяющихся единиц рДНК диплоидного вида *R. wichurana* (секция *Synstylae*) были клонированы, секвенированы и сопоставлены с рДНК других диплоидов: *R. nitida* (секция *Carolinae*), *R. rugosa* (секция *Cinnamomeae*) и *R. sericea* (секция *Pimpinellifoliae*). Показано, что в геноме *R. wichurana* присутствует только один вариант 5S рДНК, который содержит интактные элементы промотора в межгенном спейсере (МГС) и, вероятно, является транскрипционно активным. Неожиданно низкий уровень сходства (от 52,8 до 57,6%) между последовательностями МГС *R. wichurana* и трех других диплоидных видов свидетельствует о том, что для представителей секции *Synstylae* характерен новый структурный вариант 5S рДНК, и указывает на ускоренный темп молекулярной эволюции рДНК в этой секции.

Yu. O. Tynkevich, R. A. Volkov

**Novel structural class of 5S rDNA of *Rosa wichurana* Crep.**

*Genomic region encoding 5S rRNA (5S rDNA) is present in all eukaryotic organisms and represents an attractive model for investigating the mechanisms of molecular evolution of tandem arranged repeated sequences in various taxonomic groups. In order to clarify the molecular evolution of 5S rDNA in genus Rosa, several rDNA repeated units of diploid species R. wichurana (sect. Synstylae) were cloned, sequenced, and compared with rDNA sequences of other diploids: R. nitida (sect. Carolinae), R. rugosa (sect. Cinnamomeae), and R. sericea (sect. Pimpinellifoliae). It has been revealed that only one variant of 5S rDNA, which contains intact promoter elements in the intergenic spacer region (IGS) and appears to be transcriptionally active is present in the genome R. wichurana. A level of sequence similarity (from 52.8 to 57.6%) between the IGS of R. wichurana and three other diploid species is unusually low, demonstrating that a novel structural variant of 5S rDNA is characteristic of representatives of sect. Synstylae and suggesting the accelerated rate of rDNA molecular evolution in the section.*



УДК 547.962.4;612.115

**Л. П. Урвант, Є. М. Макогоненко, Т. А. Позняк, М. О. Пидюра,  
І. М. Колеснікова, П. Ю. Цап, Г. К. Березницький,  
член-кореспондент НАН України Е. В. Луговської,  
академік НАН України С. В. Комісаренко**

### **Зв'язування монАТ II-5с з А $\alpha$ 20–78 ділянкою фібриногену інгібує експозицію неоантигенної детермінанти в В $\beta$ 126–135 сайті молекули**

*Досліджено вплив монАТ II-5с, епітоп якого локалізований в А $\alpha$ 20–78 фрагменті E-регіону молекули фібриногену, на експозицію неоантигенної детермінанти монАТ I-3с у ході трансформації фібриногену в фібрин. Із застосуванням ІФ, ППР й електрофоретичного аналізу встановлено, що монАТ II-5с інгібує зв'язування монАТ I-3с з фібрином, тромбіну з фібрином і відщеплення фібринопептиду А від фібриногену в системах фібриноген + тромбін і X-фрагмент фібриногену + тромбін. Ці дані підтверджують нашу гіпотезу про тромбін-фібриногеновий субстратний комплекс як тригер структурної перебудови E-регіонів молекули фібриногену, що супроводжується формуванням у В $\beta$ 126–135 ділянці фібрину неоантигенної детермінанти монАТ I-3с.*

Раніше було встановлено, що експозиція неоантигенної детермінанти монАТ I-3с (НАД) і сайту латеральної асоціації протофібрил у фібриногені (Fg) відбувається внаслідок відщеплення від молекули тромбіном (Thr) або рептилазою фібринопептиду А (FrA) [1, 2]. Було знайдено, що НАД локалізована в В $\beta$ 126–135 фрагменті фібрину (Fn) і не існує в Fg [2, 3]. Її експозиція не пов'язана з віддаленням  $\alpha$ S-регіону від суперспірального конектора молекули або із взаємодією "А"–"а" сайтів полімеризації Fn, а є результатом структурних перебудов в E-регіоні молекули [2]. Було висловлено припущення, що тригером структурної перебудови E-регіону молекули Fg, яка супроводжується формуванням у віддаленій на  $\sim$ 9,5 нм від FrA В $\beta$ 126–135 ділянці Fg стабільного сайту НАД, є фермент-фібриногеновий субстратний комплекс — ES-комплекс. Для перевірки цієї гіпотези нами досліджено вплив моноклонального антитіла II-5с, епітоп якого локалізовано в А $\alpha$ 20–78 фрагменті E-регіону молекули і яке інгібувало полімеризацію Fn, на зв'язування монАТ I-3с з Fn і desA X<sub>1</sub>-фрагментом,

---

© Л. П. Урвант, Є. М. Макогоненко, Т. А. Позняк, М. О. Пидюра, І. М. Колеснікова, П. Ю. Цап,  
Г. К. Березницький, Е. В. Луговської, С. В. Комісаренко, 2014

на зв'язування Thr з Fn та на відщеплення Thr або анцистроном H FrA від Fg і X<sub>1</sub>-фрагмента Fg.

МонАТ II-5с було отримано за раніше описаним методом [4]. Епітоп монАТ знаходився в ділянці Aα20–78 Fn. Константа дисоціації для реакції асоціації його з фібрином становила  $2,8 \cdot 10^{-9}$  моль/л [5]. Отримані монАТ та його Fab-фрагменти інгібували полімеризацію Fn desAB.

Фібриноген і тромбін були виділені з плазми крові донорів методами Варецької [6] і Fenton [7] відповідно. X-Фрагмент Fg отримано, згідно з методом, описаним у статті [8]. Анцистрон очистили з отрути *Agkistrodon halys halys* [9]. Електрофорез в ПААГ з SDS виконували методом Laemli [10].

Експозицію неоантигенної детермінанти в Fg і X-фрагменті визначали методом імуноферментного аналізу (ІФА). Спочатку Fg або X-фрагмент додавали до концентрації 5 мкг/мл в 0,02 моль/л HEPES буфер (рН 7,4), що містив 0,3 моль/л NaCl, 0,005% твін 20, в якому було присутнє в концентрації 1,25 мкг/мл або відсутнє монАТ II-5с. Після 10 хв передінкубації при 25 °С реакцію відщеплення фібринопептидів від Fg і X-фрагмента розпочинали додаванням Thr або анцистроном H до концентрації 0,03 NIH/мл. У вказані моменти часу реакцію зупиняли додаванням інгібіторів Thr до концентрації 1 ммоль/л (PMSF) і плазмину — 10 мкг/мл (контрикал). Аліквоти (100 мкл) вносили в лунки мікропланшетів, в яких іммобілізовані монАТ I-3с слугували “catch”-антитілом. Наявність епітопу встановлювали за кількістю Fn, що зв'язався з монАТ I-3с. Фібрин визначали за допомогою монАТ II-4d, міченого біотином, і стрептавідин-HRP кон'югата.

Експозицію неоантигенної детермінанти в реальному часі детектували методом поверхневого плазмонного резонансу (ППР) на приладі Плазмон-6 (виробництво Інституту фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України). На біосенсорний чип ковалентно іммобілізували монАТ I-3с. У контрольній комірці знаходився Fg або X-фрагмент у концентрації 5 мкг/мл в 0,02 моль/л HEPES (рН 7,4), 0,3 моль/л NaCl, 0,005% твін 20, у вимовіральній комірці — Fg або X-фрагмент і монАТ II-5с у концентрації 1,5 мкг/мл. Реакцію активації Fg або X-фрагмента у вимовіральній комірці ініціювали анцистроном H в концентрації 0,01 NIH/мл. В обидві комірки додавали синтетичний пептид GPRP у концентрації 1 ммоль/л.

*Імуноферментний та ППР аналіз інгібування моноклональним АТ II-5с експозиції епітопу моноклонального АТ I-3с.* У попередніх роботах було отримано дані, які вказували на відщеплення FrA від Fg, X<sub>1</sub>- і X<sub>2</sub>-фрагментів Fg тромбіном або анцистроном H як ініціюючий момент експозиції НАД сайту в молекулах Fn desA і desAB, desA X<sub>1</sub>- і X<sub>2</sub>-фрагментах, що при цьому утворюються [1, 2]. Відщеплення FrA є результатом каталітичного акту, який здійснюється Thr і анцистроном H у складі ES-комплексу (тромбін(анцистрон H)-фібриногенового). Для Thr і батроксобіну (ферменту, подібному за специфічністю до анцистроном H) виявлено дві ділянки зв'язування на Fg, які важливі для утворення ES-комплексу [11, 12]. Одна з ділянок локалізована на FrA і взаємодіє з “аполярним” сайтом активного центру Thr [12, 13]. Друга утворена амінокислотними залишками Trp33, Fen35, Asp38, Глу39 Aα-ланцюга, Ala68, Asp69 Bβ-ланцюга і Asp27 і Глу30 γ-ланцюга, зв'язується з екзосайтом 1 Thr [12]. Для батроксобіну (або анцистроном H) друга ділянка зв'язування на Fg відрізняється від такої для Thr і точно місце її локалізації не встановлено [13]. Тому першим нашим завданням було з'ясувати, яким шляхом здійснює монАТ II-5с інгібування полімеризації Fn у системі Fg або X<sub>1</sub>-фрагмент Fg + фермент: шляхом створення стеричних перешкод для взаємодії сайтів полімеризації Fn (A-a і C-c),

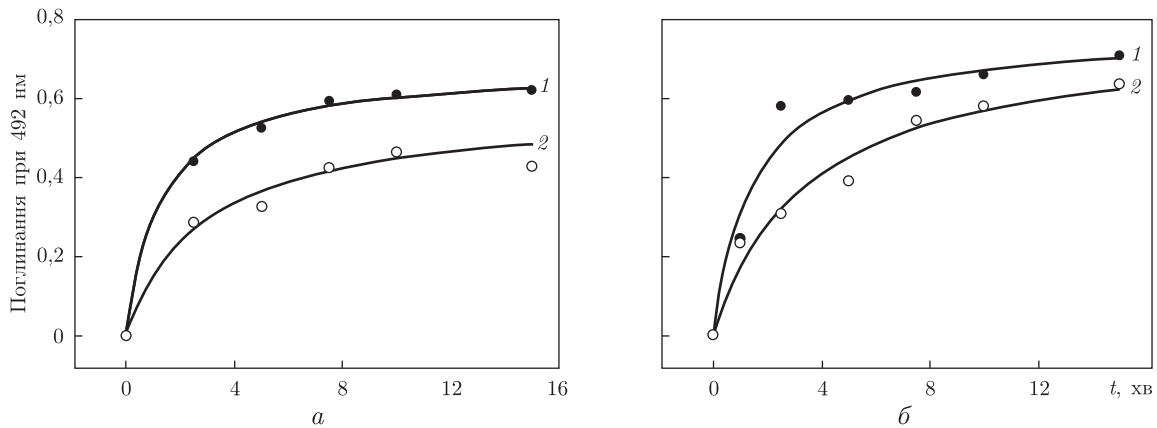


Рис. 1. Імуноферментний аналіз інгібування моноклональним АТ ІІ-5с зв'язування монАТ І-3с з Fg (а) і X<sub>1</sub>-фрагментами Fg (б), активованими тромбіном і іммобілізованими в комірках мікропланшета.  
Криві: 1 — у відсутності та 2 — у присутності монАТ ІІ-5с

як у випадку desAB фібрину, або також шляхом блокування утворення і функціонування ES-комплексу?

Для вирішення цього питання нами досліджено методом ІФА вплив монАТ ІІ-5с на зв'язування Fg та його X-фрагмента після обробки тромбіном та іммобілізації в комірках мікропланшета з монАТ І-3с. Fg і X<sub>1</sub>-фрагмент попередньо інкубували з монАТ ІІ-5с у молярному співвідношенні 2 : 1 впродовж 30 хв при 25 °С. В обох системах — Fg + монАТ ІІ-5с та X<sub>1</sub>-фрагмент + монАТ ІІ-5с — спостерігали інгібування зв'язування монАТ І-3с з іммобілізованими в комірках мікропланшета Fn і desA X<sub>1</sub>-фрагментом Fg (рис. 1). Величина пригнічення їх зв'язування, яке характеризує рівень експозиції НАД, становила 30 і 15% для Fg + Thg та X<sub>1</sub>-фрагмент + Thg систем відповідно. Цей дослід показує, що монАТ ІІ-5с інгібує (частково) експозицію віддалених від FpA НАД сайтів, а отже, й ES-комплексу. Звідси випливає, що монАТ ІІ-5с інгібує полімеризацію Fn у системах Fg + Thg і X<sub>1</sub>-фрагмент Fg + Thg також шляхом блокування, можливо частково, ES-комплексу.

Для того щоб виключити можливий вплив полімеризації молекул фібрину або desA X<sub>1</sub>-фрагментів на доступність сайту НАД до монАТ І-3с, нами досліджено *in situ* в реальному часі зв'язування Fn і desA X<sub>1</sub>-фрагментів, які формувались у системах Fg + анцистрон Н + GPRP та X<sub>1</sub>-фрагмент Fg + анцистрон Н + GPRP, з іммобілізованим на чип монАТ І-3с із використанням методу ППР (рис. 2).

За цих умов олігомеризація і полімеризація Fn і desA X<sub>1</sub>-фрагментів були повністю блоковані пептидом GPRP і інгібуючий вплив монАТ ІІ-5с міг повністю проявити себе. Раніше було показано, що GPRP пептид не впливає на експозицію НАД у системі Fg + анцистрон Н [2]. Як свідчать результати, що представлені на рис. 2, монАТ ІІ-5с зменшувало рівень експозиції НАД в Fn і desA X<sub>1</sub>-фрагменті Fg на 49 і 43% відповідно. Оскільки молярне відношення монАТ ІІ-5с до Fg/X<sub>1</sub>-фрагмента становило 1 до 2, то рівень інгібування експозиції НАД, коли фібриноген/X<sub>1</sub>-фрагмент знаходяться в *мономерній формі* і антиполімеризаційна компонента дії монАТ ІІ-5с відсутня, наближається до теоретично можливого рівня. Цей експеримент підтверджує висновок про те, що монАТ ІІ-5с інгібує експозицію НАД, ймовірно, перешкоджаючи роботі ES-комплексу Thg(анцистрон Н)-Fg. Крім того, стає очевидним, що інгібування полімеризації Fn монАТ ІІ-5с в умовах експерименту відбувається також і шляхом блокування роботи ES-комплексу.

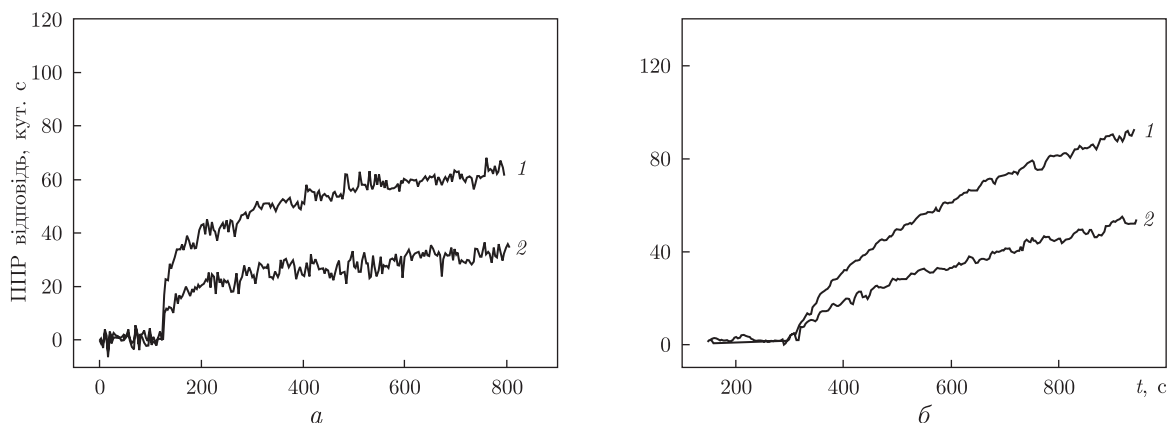


Рис. 2. ППР аналіз інгібування моноклональним АТ II-5с зв'язування Fg (а) і X-фрагмента Fg (б), активованих анцистроном Н, до монАТ I-3с, іммобілізованого на імуносенсорний чип, у відсутності (1) і в присутності (2) монАТ II-5с за умов блокування полімеризації фібрину і desA X<sub>1</sub>-фрагмента пептидом GPRP

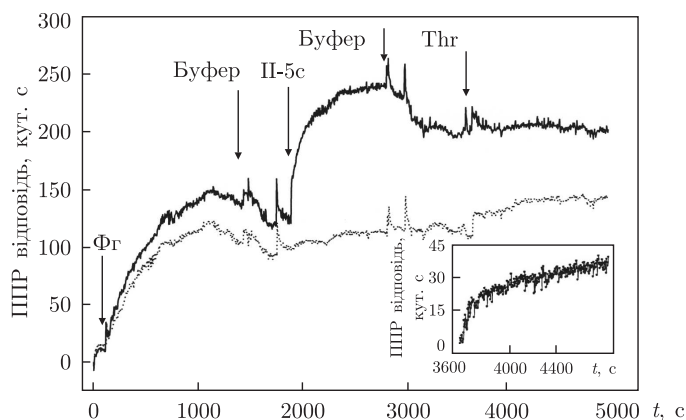


Рис. 3. ППР аналіз інгібування моноклональним АТ II-5с зв'язування тромбіну з фібриногеном, сорбованим на монАТ II-4d, яке ковалентно іммобілізоване на імуносенсорний чип.

Суцільною лінією позначено сенсограму з робочої комірки, пунктирною — сенсограму з контрольної комірки. Стрілками показано момент введення в комірки Fg, буферу для промивки, тромбіну. До контрольної комірки монАТ II-5с не додавали.

На вставці представлено різницю між сенсограмами, отриманими з контрольної і робочої комірок після введення в них тромбіну впродовж 3600–4800 с

*ППР аналіз впливу монАТ II-5с на зв'язування тромбіну з фібрин(оген)ом, іммобілізованим на імуносенсорний чип.* Для з'ясування питання, на якому етапі функціонування ES-комплексу, а саме: утворення комплексу, каталітичного акту або передачі структурних змін від лейкоподібного домену E-регіону до Вβ126–135 ділянки Fg, — монАТ II-5с блокує його роботу, було досліджено вплив останнього на зв'язування Thr з іммобілізованим на імуносенсорний чип Fg. Зв'язування Thr з Fg є перший етап формування тромбін-фібриногенового субстратного комплексу.

Для цього на чип було ковалентно іммобілізовано фібриноген-специфічне монАТ II-4d [14]. Потім в робочу і контрольну комірки одночасно був введений Fg в 0,02 моль/л NEPES буфері, рН 7,4, що містив 0,3 моль/л NaCl, 0,005% твін 20, у концентрації 5 мкг/мл (рис. 3). Після відмивання комірок буфером в робочу комірку було введено монАТ II-5с



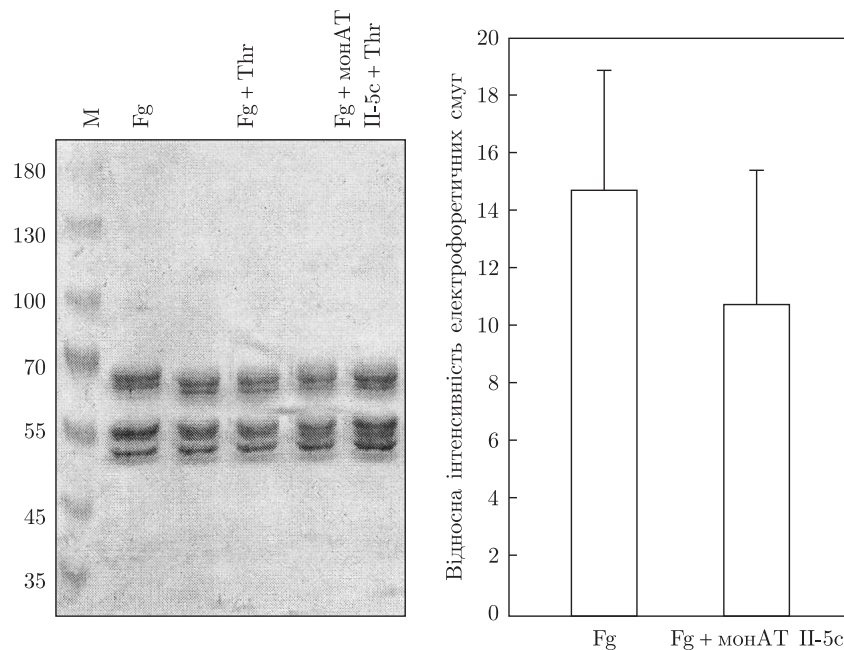


Рис. 4. Електрофоретичний і денситометричний аналіз пептидної смуги  $\alpha$ -ланцюга фібриногену, активованого тромбіном, у присутності та відсутності монАТ ІІ-5с. Активацію тромбіном проведено у присутності 1 ммоль/л GPRP

в тому самому буфері в концентрації 1,5 мкг/мл, а в контрольну комірку — тільки буферний розчин. Обидві комірки були відмиті буфером, що містив 0,15 моль/л NaCl, і в них вводили розчин Thr у концентрації 10 NIH/мл (0,28 мкмоль/л) у цьому буфері. Як свідчать сенсограми, що представлені на рис. 3, в контрольній комірці у відсутності монАТ ІІ-5с зв'язування Thr було значно більше у порівнянні з таким у робочій комірці. На вставці рис. 3 наведено різницю у відповідях, зареєстрованих з контрольної і робочої комірок після введення у них Thr. Отримані дані вказують на те, що зв'язування монАТ ІІ-5с з фібриногеном істотно блокує зв'язування Thr з Fg за участю екзосайта 1 Thr. У результаті двосайтова взаємодія Thr у субстратному Thr-Fg комплексі істотно порушується і це викликає порушення в роботі ES-комплексу, що призводить до зменшення експозиції епітопу монАТ І-3с (див. рис. 2). Результати дослідження також дозволяють припустити, що в епітопі монАТ ІІ-5с входять амінокислотні залишки Trp33, Fen35, Asp38, Глу39  $A\alpha$ -ланцюга Fg, які належать петлі, що охоплює лейкоподібний домен E-регіону молекули, і входять до ділянки зв'язування Thr на Fg [11].

*Електрофоретичний аналіз інгібування монАТ ІІ-5с відщеплення FpA від Fg і X-фрагмента Fg тромбіном.* Зв'язування монАТ ІІ-5с з Fg істотно блокує зв'язування Thr з Fg (див. рис. 3) і пригнічує експозицію НАД (див. рис. 1, 2). Для з'ясування питання, який з подальших етапів роботи ES-комплексу — відщеплення тромбіном FpA від молекули або передачу структурних змін від лейкоподібного домену до B $\beta$ 126–135 ділянки Fg — інгібує монАТ ІІ-5с, було досліджено вплив останнього на відщеплення тромбіном FpA від Fg і X<sub>1</sub>-фрагмента Fg (рис. 4). Для цього Fg або X<sub>1</sub>-фрагмент, які додавали до концентрації 0,2 мг/мл у 0,02 моль/л HEPES (рН 7,4), що містив 0,3 моль/л NaCl і 0,005% твін 20, інкубували у присутності або відсутності монАТ ІІ-5с впродовж 10 хв. Потім в інкубаційне сере-

довище додавали 1 ммоль/л GPRP, 0,1 ммоль/л ПХМБ і Thг до концентрації 0,1 НИН/мл. Реакцію зупиняли додаванням інгібіторів Thг до концентрації 1 ммоль/л (PMSF) і плазміну — 10 мкг/мл (контрикал). Продукти реакції Fg і X<sub>1</sub>-фрагмента Fg з Thг у присутності та відсутності монАТ II-5с піддавали електрофоретичному аналізу у відновлювальних дисульфідні зв'язки умовах. Денситометричний аналіз білкової смуги  $\alpha$ -ланцюга Fg показав зменшення її інтенсивності на 12% у присутності монАТ II-5с (див. рис. 4). Інтенсивність смуги 24 кДа фрагмента  $\alpha$ -ланцюга X<sub>1</sub>-фрагмента Fg у системі X<sub>1</sub>-фрагмент Fg + Thг зменшувалась на 24% (не подано). Привертають увагу близькі значення пригнічення рівня експозиції НАД та рівня відщеплення FpA монАТ II-5с незалежно від того, заблокована або ні полімеризація та олігомеризація Fп і desA X<sub>1</sub>-фрагментів Fg пептидом GPRP (див. рис. 1). Отримані результати свідчать, що монАТ II-5с інгібує стадію відщеплення FpA тромбіном від молекули Fg, проте рівень пригнічення відщеплення FpA менше рівня інгібування зв'язування Thг з Fп і пригнічення експозиції НАД на мономерному Fп.

Таким чином, результати проведеного дослідження підтверджують гіпотезу про ES-комплекс як тригер експозиції НАД у Fп. Вони дозволяють припустити, що двоцентрова взаємодія Thг з Fg, ймовірно, не є важливою для експозиції НАД, оскільки інгібування зв'язування Thг, опосередкованого взаємодією екзосайту 1 з сайтом, утвореним амінокислотними залишками Trp33, Fen35, Asp38, Глу39 A $\alpha$ -ланцюга, Ala68, Asp69 B $\beta$ -ланцюга і Asp27 і Глу30  $\gamma$ -ланцюга, істотно не порушує каталітичну функцію субстратного комплексу — відщеплення FpA — і експозицію НАД. Це погоджується з даними про те, що пептид A $\alpha$ 27–50 Fg інгібує полімеризаційну активність Thг, але не впливає на каталітичну активність його активного центру [15]. З іншого боку, блокування активного центру Thг не впливає на його зв'язування з E-гементиним фрагментом Fg [11]. Обидва факти вказують на важливість каталітичного акту як тригера експозиції НАД. Очевидно, що ключовою подією для необоротної індукції експозиції НАД у Fg є взаємодія FpA з аполярним сайтом і активним центром Thг і відщеплення FpA. Можна очікувати, що ділянка A $\alpha$ 1–27 молекули Fg, яка включає FpA і фрагмент A $\alpha$ 17–27 у комплексі з ферментом, утворюють з лейкоподібним доменом E-регіону тимчасову структуру, яка стабілізує конформацію усього E-регіону молекули (A $\alpha$ 1–110, B $\beta$ 1–138 і  $\gamma$ 1–58)<sub>2</sub>.  $\alpha$ C-регіони і B $\beta$ 1–42 пептиди не входять до цієї структури, оскільки в X<sub>2</sub>-фрагменті Fg також експонується сайт НАД після відщеплення FpA [2]. Відщеплення FpA руйнує цю структуру і індукує структурні перебудови у воронкоподібному субдомени E-регіону, які за участю  $\alpha$ -спіралей A $\alpha$ -, B $\beta$ - і  $\gamma$ -ланцюгів транслокуються до B $\beta$ 126–135 сайтів молекули фібрину.

1. *Lugovskoy E. V., Gritsenko P. G., Kolesnikova I. N. et al.* A neoantigenic determinant in coiled coil region of human fibrin  $\beta$ -chain // *Thromb. Res.* – 2009. – **123**, No 5. – P. 765–770.
2. *Урвант Л. П., Макогоненко Є. М., Березницький Г. К. та ін.* Відщеплення фібринопептиду А викликає структурні перебудови в 118–134 ділянці B $\beta$ -ланцюга молекули фібрин(оген)у // *Доп. НАН України.* – 2012. – № 7. – P. 170–175.
3. *Урвант Л. П., Макогоненко Є. М., Пидюра М. О. та ін.* Локалізація епітопу фібрин-специфічного моноклонального антитіла I-3с в ділянці 118–134 B $\beta$ -ланцюга фібрину // *Там само.* – 2013. – № 10. – С. 177–181.
4. *Колеснікова І. М., Луговська Н. Е., Луговської Е. В. та ін.* Моноклональні антитіла, специфічні до фібрину людини // *Там само.* – 2006. – № 9. – С. 181–185.
5. *Friguet B., Chaffotte A. F., Djavadi-Ochaniance Z., Goldberg M. E.* Measurement of the true affinity constant in solution of antigen-antibody complexes by enzyme-linked immunosorbent assay // *J. Immunol. Meth.* – 1985. – **77**, No 2. – P. 305–319.

6. *Варецька Т. В.* Мікрогетерогенність фібриногену. Кріофібриноген // Укр. біохім. журн. – 1960. – **32**, № 1. – С. 13–24.
7. *Thompson A. R., Enfield D. L., Ericsson L. H. et al.* Human thrombin: partial primary structure // Arch. Biochem. Biophys. – 1977. – **178**, No 2. – P. 356–367.
8. *Медведь Л. В., Горжун О. В., Маняков В. Ф., Белицер В. А.*  $\alpha$ C-Домены молекулы фибриногена как структуры, ускоряющие самосборку фибрина // Молекул. биология. – 1986. – **20**, № 2. – С. 461–470.
9. *Solov'ev D. A., Ugarova T. P.* Isolation and characteristics of alpha-specific thrombin-like enzymes from venoms of the common pit viper (*Agkistrodon halys halys*) and the eastern pit viper (the central Asian subspecies *Agkistrodon halys blomhoffii*) // Biokhimiia. – 1993. – **58**, No 8. – P. 1221–1233.
10. *Laemmli U. K.* Cleavage of structural proteins during the assembly of the head of bacteriophage T4 // Nature. – 1970. – **227**, No 5259. – P. 680–685.
11. *Pechik I., Madrazo J., Mosesson M. W. et al.* Crystal structure of the complex between thrombin and the central “E” region of fibrin // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 2004. – **101**, No 9. – P. 2718–2723.
12. *Vu T. T., Stafford A. R., Leslie B. A. et al.* Batroxobin binds fibrin with higher affinity and promotes clot expansion to a greater extent than thrombin // J. Biol. Chem. – 2013. – **288**, No 23. – P. 16862–16871.
13. *Stabbs M. T., Bode W. A.* A player of many parts: a spotlight falls on thrombin structure // Thromb. Res. – 1993. – **69**, No 1. – P. 1–59.
14. *Lugovskoy E. V., Gritsenko P. G., Kolesnikova I. N. et al.* Two monoclonal antibodies to D-dimer-specific inhibitors of fibrin polymerization // Thromb Res. – 2004. – **113**, No 3/4. – P. 251–259.
15. *Biennie C. D., Lord S. T.* A synthetic analog of fibrinogen alpha 27–50 is an inhibitor of thrombin // Thromb. Haemost. – 1991. – **65**, No 2. – P. 165–168.

*Інститут біохімії ім. О. В. Палладіна  
НАН України, Київ*

*Надійшло до редакції 18.11.2013*

**Л. П. Урвант, Е. М. Макогоненко, Т. А. Позняк, Н. А. Пыдюра,  
И. Н. Колесникова, П. Ю. Цап, Г. К. Березницький,  
член-корреспондент НАН України Э. В. Луговской,  
академик НАН України С. В. Комисаренко**

### **Связывание монАТ II-5с с $A\alpha 20-78$ участком фибриногена ингибирует экспозицию неоантигенной детерминанты в $B\beta 126-135$ сайте молекулы**

*Исследовано влияние монАТ II-5с, эпитоп которого локализован в  $A\alpha 20-78$  фрагменте E-региона молекулы фибриногена, на экспозицию неоантигенной детерминанты монАТ I-3с в ходе трансформации фибриногена в фибрин. С применением ИФ, ППР и электрофоретического анализа установлено, что монАТ II-5с ингибирует связывание монАТ I-3с с фибрином, тромбина с фибрином и отщепление фибринопептида А от фибриногена в системах фибриноген + тромбин и X-фрагмент фибриногена + тромбин. Эти данные подтверждают нашу гипотезу о тромбин-фибриногеновом субстратном комплексе как триггере структурной перестройки E-регионов молекулы фибриногена, что сопровождается формированием в  $B\beta 126-135$  участке фибрина сайта неоантигенной детерминанты монАТ I-3с.*

L. P. Urvant, E. M. Makogonenko, T. A. Pozniak, N. A. Pydiura,  
I. N. Kolesnikova, P. Y. Tsap, G. K. Bereznitzkiy,  
Corresponding Member of the NAS of Ukraine E. V. Lugovskoy,  
Academician of the NAS of Ukraine S. V. Komisarenko

**Binding of mAb II-5c to A $\alpha$ 20–78 fragment of fibrinogen inhibits a neoantigenic determinant exposure within B $\beta$ 126–135 site of a molecule**

*The influence of mAb II-5c, epitope of which was localized within A $\alpha$ 20–78 fragment of the E-region of fibrinogen molecule, on the exposure of mAb I-3c neoantigenic determinant at the transformation of fibrinogen to fibrin has been investigated. Using ELISA, SPR, and electrophoretic analysis, we have found that mAb II-5c inhibited the binding of mAb I-3c to fibrin, thrombin to fibrin, and thrombin cleavage of fibrinopeptide A from fibrinogen in fibrinogen + thrombin and X-fragment fibrinogen + thrombin systems. These data support our hypothesis that the thrombin-fibrinogen substrate complex is a trigger of the restructuring of a fibrinogen molecule at the transformation in fibrin, which is accompanied by the formation of neoantigenic determinants of mAb I-3c within B $\beta$ 126–135 site of a molecule.*



УДК 612.825.8:613.685

**В. В. Кальниш, А. В. Швец**

## **Проблема надежности: новый подход к оценке качества операторской деятельности**

*(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины И. М. Трахтенбергом)*

*Предложен новый подход к определению надежности операторской деятельности с помощью построения профиля надежности каждого оператора при моделировании информационной составляющей его профессиональных обязанностей. Показано, что использование профиля надежности операторской деятельности открывает новые и широкие перспективы в понимании поведения человека в различных ситуациях его профессиональной деятельности и обеспечивает более точную оценку надежности работы.*

Проблема психофизиологического обеспечения надежности деятельности операторов имеет достаточно проработанные теоретические основы и четкие практические результаты благодаря многочисленным исследованиям [1–5]. Стремительно развиваясь, она за короткое время приобрела общегосударственное значение в нашей стране. Вместе с тем несмотря на значительное внимание, которое современные исследователи уделяют проблеме надежности операторской деятельности, данный вопрос еще далек от решения.

Существование проблемы надежности во многом связано с тем обстоятельством, что человек-оператор по тем или иным причинам может допускать в процессе своей деятельности ошибки различного характера. Следовательно, целесообразно отметить, что проблема надежности оператора “выросла” из проблемы появления его ошибок [1, 6]. Многочисленные исследования подтверждают влияние на надежность деятельности и процесс принятия решений: сложности заданий и возникающих вследствие этого информационных перегрузок [2–4]; разнообразных внешних воздействий [5, 7]; пола [8]; возраста [6]; уровня развития профессионально важных качеств, навыков [9] и так далее.

В психофизиологическом понимании надежность главным образом рассматривалась в контексте методов ее определения [10], таких как: вероятность безошибочной работы; стабильность характеристик точности выполнения заданий; запас резервных возможностей человека, которые могут быть включены в деятельность в случае осложнения ситуации; способность поддерживать рабочие параметры в условиях действия экстремальных факторов.

---

© В. В. Кальниш, А. В. Швец, 2014

Наиболее простым и популярным методом оценки надежности оператора является определение вероятности безошибочности (или ошибочности) его профессиональной деятельности. Этот метод имеет неоспоримое преимущество в том, что получаемая оценка не косвенно, а прямо отражает надежность работы оператора. Однако в нем имеются и недостатки. Например, исследование непосредственно самого реального объекта (профессиональной надежности), как правило, недоступно или весьма затруднительно (особенно в случае развития аварийных ситуаций). Кроме того, количество ошибок профессионала весьма мало и поэтому точная оценка надежности оператора требует много времени для учета ошибочных и безошибочных действий. Ввиду этого часто возникает потребность в моделировании отдельных компонентов деятельности во внепроизводственных условиях.

При неодинаковой сложности решаемых заданий и темпе их предъявления, а также вследствие действия других факторов и их сочетаний возникают существенно различающиеся неаддитивные ситуации, способствующие появлению ошибок. Свидетельством этому могут служить данные о времени и количестве операций, выполняемых работником (например, диспетчером электрических сетей) в штатной и аварийной ситуациях [11], которые в значительной мере определяют сложность его ответных действий. Было четко показано, что работа в аварийной ситуации существенно отличается от таковой в штатной по параметрам нагрузки на те или иные психофизиологические функции работающего человека [12]. Таким образом, можно утверждать, что условия появления ошибок не являются аддитивными и поэтому оценка надежности с помощью определения вероятности ошибочной деятельности, т. е. путем суммирования количества ошибок, возникающих в разных обстоятельствах, не способствует получению объективного результата. Это обстоятельство совершенно игнорируется при оценке надежности традиционным способом. Поэтому целью настоящего исследования стало создание нового подхода к оценке надежности операторской деятельности с учетом неаддитивности условий появления ошибок.

**Материалы и методы.** В качестве объекта исследований была взята однородная группа операторов (40 мужчин, возраст 18–23 года), которые выполняли профессиональные обязанности радиотелеграфиста на протяжении суток. Исследование психофизиологических характеристик этих лиц проводили в утреннее время (с 8<sup>00</sup> до 9<sup>00</sup> ч) до начала суточного дежурства и непосредственно после него [13].

Психофизиологические характеристики регистрировали с помощью специального аппаратно-программного комплекса, который был разработан в Харьковском национальном университете радиоэлектроники [14]. Методики оценки психофизиологических функций были реализованы с использованием защитных непрозрачных очков с вмонтированными разноцветными светодиодами, обеспечивающими стандартизацию предъявления раздражителей и надлежащую контрастность фона и стимула. Диагностирование надежности работы осуществлялось с помощью модифицированной методики Н. В. Макаренко [6], моделирующей простейшую операторскую деятельность, реализованной с обратной связью.

Анализ результатов проводился с помощью следующих методов: нелинейного регрессионного, кластерного и двухфакторного дисперсионного анализа с использованием пакета программ STATISTICA 6.1.478.0. (№GGHGGJ6TUABC4RGRHBCG) [15].

**Результаты и их обсуждение.** Поскольку каждая из выполняемых оператором задач вызывает у него напряжение определенных функций организма, а решение задач с более высокой сложностью требует от него больших усилий, то работа в условиях с разнородной сложностью заданий является неодинаковой и по параметру надежности их решения. По всей видимости, при оценке надежности деятельности следует учитывать тот непреложный

факт, что появление ошибки при решении простых задач ничтожно мало, а при решении сверхсложных — максимально возможно. Исходя из этих соображений, уместно предложить универсальное описание изменения надежности деятельности при решении широкого спектра (по параметру сложности) задач с помощью логистической кривой. При анализе этой кривой можно условно выделить в ней три участка: пологий — с максимально низкой вероятностью безошибочности действий оператора (при решении задач со сверхвысокой для данного человека сложностью); с плавно убывающей вероятностью появления ошибок (при решении задач средней сложности); еще один пологий — с максимально высокой вероятностью безошибочности действий оператора (при решении задач низкой сложности). Формула, описывающая логистическую кривую, имеет вид  $p(\tau) = 1/(1 + e^{(a-b \times \tau)})$ , где  $p(\tau)$  — вероятность надежности деятельности;  $\tau$  — экспозиция предъявляемого сигнала, мс;  $a$  и  $b$  — коэффициенты, отражающие функциональное состояние и уровень развития профессионально важных качеств оператора.

Следовательно, не значение, описывающее некую условно усредненную вероятность появления ошибки при традиционной оценке надежности, а кривая, отображающая весь спектр реакций человека при решении задач разной сложности, более адекватно характеризует надежность профессиональной деятельности оператора. Такую кривую можно назвать “профилем надежности деятельности”. Доказательством реального существования такой зависимости могут служить результаты исследования, отражающие изменение вероятности появления ошибок от сложности предъявляемой информации у лиц, находящихся в состоянии спокойного бодрствования и в стрессовой ситуации [7].

Таким образом, *профиль надежности деятельности* (ПНД) можно определить как согласованную совокупность характеристик, представляющую собой линию, построенную по комплексу значений, отображающих соответствие вероятности правильного решения потока задач и скорости их предъявления, демонстрирующих трансформацию параметра надежности деятельности при усложнении перерабатываемой информации. Такая кривая более адекватно отражает возможные варианты поведения человека при решении задач различной сложности.

Интересно, что обсуждаемый профиль хорошо чувствителен к функциональному состоянию человека. В частности, при развитии утомления после суточного дежурства радиотелеграфистов структура профиля надежности деятельности закономерно изменяется, характеризуя ухудшение возможностей уставшего человека перерабатывать информацию [13]. Таким образом, ПНД отражает не только формальную сторону изменения надежности деятельности от темпа предъявления заданий в разнообразных условиях и режимах деятельности, но и может служить характеристикой изменения функционального состояния, выраженности профессионально важных качеств оператора.

Решение вопроса об исследовании свойств ПНД проводилось в несколько этапов. Сначала были построены логистические кривые, описывающие ПНД операторов по данным решения тестовых задач в конце смены, когда работники из-за накопленной усталости были склонны делать большее количество ошибок. Для выделения однородных групп по степени надежности деятельности операторов был проведен кластерный анализ индивидуальных ПНД. В результате были выделены две подгруппы лиц, различающихся по уровню надежности (рис. 1). В подгруппу 1 попали радиотелеграфисты, надежность деятельности которых по результатам двухфакторного дисперсионного анализа достоверно ( $p < 0,001$ ) выше, чем в подгруппе 2. Большая подгруппа (подгруппа 1) состояла из людей с “высоким” уровнем надежности профессиональной деятельности (77,5%), а меньшая (32,5%) — с “низким”.

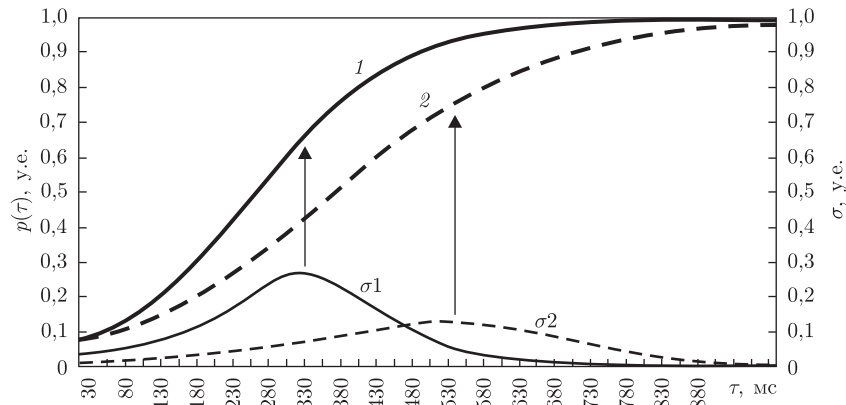


Рис. 1. Профили надежности деятельности подгруппы с “высоким” (подгруппа 1 — 1) и “низким” (подгруппа 2 — 2) ПНД.

$p(\tau)$  — вероятность надежной деятельности;  $\sigma_1(\tau)$  — функция средних квадратических отклонений вероятности надежной деятельности для лиц подгруппы 1;  $\sigma_2(\tau)$  — функция средних квадратических отклонений вероятности надежной деятельности для лиц подгруппы 2

Здесь необходимо подчеркнуть, что степени свободы действий операторов при выполнении заданий разной сложности сказываются на уровне разброса (среднего квадратического отклонения —  $\sigma$ ) вероятности надежной деятельности. Динамика кривых для обеих подгрупп  $\sigma_1(\tau)$  и  $\sigma_2(\tau)$  имеет колоколообразную форму, т. е. степени свободы действий операторов не являются одинаковыми для разных скоростей предъявления заданий. У этих кривых можно выделить явно выраженный максимум. Причем максимум  $\sigma_1(\tau)$  имеет гораздо большее значение ( $p < 0,01$ ), чем максимум  $\sigma_2(\tau)$ . Это свидетельствует о том, что разнообразие реакций у представителей подгруппы с “высоким” уровнем надежности профессиональной деятельности гораздо больше, чем у представителей подгруппы 2. Иными словами, операторы, имеющие существенный “запас” надежности, могут позволить себе в большей степени разнообразить свои реакции. Интересным является тот факт, что максимум кривой  $\sigma_1(\tau)$  находится в области более высоких темпов предъявления заданий по сравнению с максимумом  $\sigma_2(\tau)$ . Однако вероятность надежной деятельности и в том и другом случае достаточно близка и находится в диапазоне 0,65–0,75 (или 65–75%), т. е. на более высоком уровне, чем точка проявления 50% равновесия между числом правильных и ошибочных действий при решении текущих задач (ПНД<sub>50</sub>). Таким образом, на профиле ПНД можно выделить “особую” область, отражающую надежность деятельности в условиях проявления максимальной степени свободы операторов.

Анализируя приведенные закономерности, целесообразно поставить вопрос об установлении критериев надежности операторской деятельности, решение которого является важным как с теоретической, так и с практической точек зрения. Одним из подходов к решению этого вопроса является установление области колебаний коэффициентов  $a$  и  $b$  логистической кривой, отражающей ПНД операторов с “высоким” уровнем надежности профессиональной деятельности. Для выяснения этого вопроса, во-первых, был получен среднегрупповой или “нормативный” (по группе с “высоким” уровнем надежности) профиль — ПНД<sub>н</sub>. Именно ПНД<sub>н</sub> является удовлетворительным при выполнении операторами своих служебных обязанностей (см. рис. 1). Во-вторых, с помощью метода Монте-Карло и примененного для установления достоверных различий каждого индивидуального ПНД и ПНД<sub>н</sub> была выявлена область, где индивидуальное ПНД, с соответствующим сочетанием коэффициен-



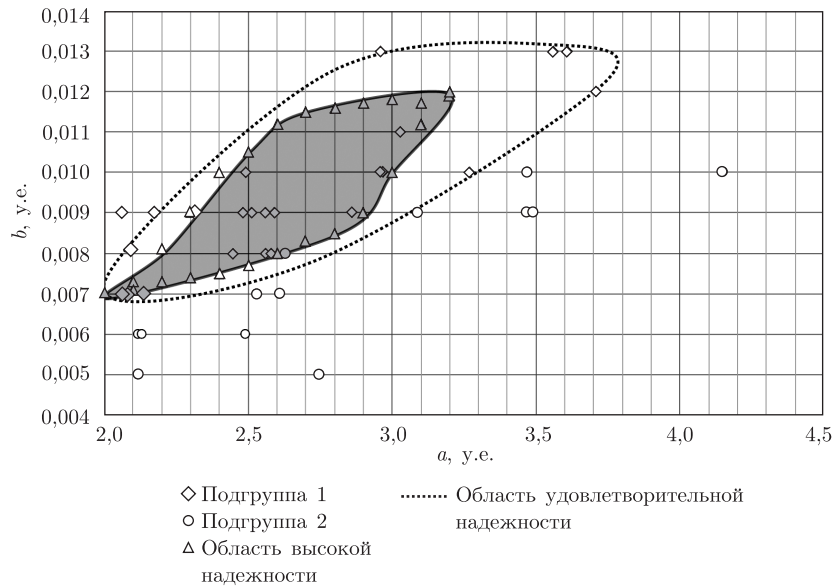


Рис. 2. Соответствие характеристик индивидуальных ПНД ( $a$  и  $b$ ) “нормативной” (“высокой” и “удовлетворительной”) области надежности деятельности операторов

тов логистической кривой, еще могло трактоваться как ПНД, принадлежащее континууму ПНД<sub>н</sub> с вероятностью  $p < 0,05$  для лиц с “высокой” или  $p < 0,1$  для лиц с “удовлетворительной” надежностью (рис. 2).

Отклонение параметров ПНД от области ПНД<sub>н</sub> можно трактовать как “неудовлетворительную” надежность профессиональной деятельности. Имея координаты выделенной области надежной деятельности, можно по уровню коэффициентов  $a$  и  $b$  индивидуальных ПНД принимать решение об удовлетворительности или неудовлетворительности операторской деятельности конкретного человека. Как видно из рис. 2, определенный процент представителей подгруппы 1 не попал в область “высокой” или “удовлетворительной” надежности деятельности (25,9% при  $p < 0,05$ ; 7% при  $p < 0,1$ ). И, наоборот, некоторые представители подгруппы 2 (7,7% при  $p < 0,05$ ; 15,4% при  $p < 0,1$ ) попали в эту область. Такое положение вещей, вероятно, можно объяснить определенной неточностью использованного метода кластерного анализа, разделившего группу испытуемых на подгруппы 1 и 2. Однако выявление четких границ областей с “высокой” и “удовлетворительной” надежностью деятельности позволяет подкорректировать указанную нечеткость первоначальной обработки результатов тестирования.

Одним из приемов дальнейшей проверки качества работы описанного двухступенчатого алгоритма был способ соотнесения значений коэффициентов  $a$  и  $b$  для лиц, имеющих существенные различия в функциональном состоянии. Дело в том, что предварительно с помощью комплекса специальных приемов было исследовано функциональное состояние обследованных радиотелеграфистов [13]. Эта оценка показала, что у части из них функциональное состояние можно описать термином “умеренное” утомление, а у другой части — как “выраженное” утомление. Естественно, следовало бы предположить, что группа с “выраженным” утомлением не попадет в область ПНД<sub>н</sub>, а группа с “умеренным” утомлением — попадет. Однако проведенный анализ показал, что в подгруппу с “неудовлетворительным” уровнем надежности попало 25% “умеренно” утомленных операторов, а в подгруппу с “высо-

ким” — 37,5% лиц с “выраженным” утомлением. Это свидетельствует о том, что степень утомления, как правило, существенно влияет на надежность операторской деятельности, но некоторые операторы, имеющие значительные функциональные резервы, еще могут некоторое время удовлетворять критериям надежности. Другие, входящие в подгруппу с “умеренным” утомлением, уже исчерпали свои возможности в процессе суточного дежурства и не могут надежно работать.

Таким образом, часть операторов, имевших состояние, которое можно трактовать как “выраженное” утомление, все же принадлежат к континууму “надежных” операторов. Большая же часть этой группы не удовлетворяет указанному критерию и, следовательно, не может отвечать требованиям к осуществлению профессиональной деятельности радиотелеграфиста. Выделена также группа лиц, не относящаяся к области ПНД<sub>н</sub>, которая имеет только “умеренный” уровень утомления. Такое положение вещей, по-видимому, связано с тем, что эти лица не являются профессионально пригодными к работе радиотелеграфиста, хотя и могут хорошо переносить длительную сменную работу. Полученное разнообразие принадлежности или не принадлежности операторов к области ПНД<sub>н</sub> свидетельствует о том, что реакции человека, работающего в сложных условиях суточного дежурства, могут быть неодинаковыми. Это необходимо учитывать при допуске на работу.

Необходимо также отметить, что поиск новых более точных методов оценки и прогнозирования надежности операторской деятельности является важной задачей современных исследований. Описанные в настоящей работе подходы позволяют по-новому рассматривать проблему надежности и получить из имеющихся данных не усредненную, а более точную развернутую информацию о процессах обеспечения должной надежности операторской деятельности. Они являются важными для выяснения возможностей оператора выполнять работу по принятию решений в различных условиях, что может быть использовано для проведения профессионального отбора, допуска человека к работе (предсменный контроль), допуска к работам с повышенной опасностью в условиях развития чрезвычайных ситуаций и пр. Анализ ПНД каждого оператора при моделировании его деятельности открывает широкие перспективы в понимании поведения человека в различных ситуациях и обеспечивает более точную оценку надежности его работы. Предложенные подходы к анализу надежности операторской деятельности, естественно, требуют дальнейшего развития.

1. *Войтенко А. М.* Психофизиологический анализ причин ошибочных действий человека-оператора // Вестн. Балт. пед. акад. – 2006. – Вып. 69 – С. 49–57.
2. *Theerasak P.* Information overload among professionals in Thailand // J. Inform. Technol. Impact. – 2010. – **10**, No 3. – P. 171–200.
3. *Himma K. E.* The concept of information overload: A preliminary step in understanding the nature of a harmful information-related condition // Ethics and Inform. Technol. – 2007. – **9**. – P. 259–272.
4. *Mount W. M., Tuček D. C., Abbass H. A.* Psychophysiological Evaluation of Task Complexity and Cognitive Performance in a Human Computer Interface Experiment // ICONIP'12. Proc of the 19<sup>th</sup> Intern. conf. on Neural Information Processing, Doha, Qatar, November 12–15, 2012. – Berlin; Heidelberg: Springer, 2012. – P. 600–607.
5. *Novak D., Mihelj M., Munih M.* Dual-task performance in multimodal human-computer interaction: a psychophysiological perspective // Multimedia Tools and Applications. – 2012. – **56**, No 3. – P. 553–567.
6. *Makarenko M. V., Lizogub V. S., Kozhemyako T. V., Chernenko N. F.* Age Characteristics of the Speed of Central Information Processing In Persons with Different Levels of Functional Mobility of Nervous Processes // Int. J. Physiol. and Pathophysiol. – 2011. – **2**, No 4. – P. 335–341.
7. *Швець А. В., Кальниш В. В.* Особливості впливу різних психофізіологічних станів на надійність операторської діяльності // Військ. медицина України. – 2009. – № 1. – С. 84–91.
8. *Кальниш В. В., Швець А. В., Левит Й. Р.* Гендерні особливості надійності операторської діяльності // Журн. АМН України. – 2009. – **15**, № 4. – С. 755–768.

9. *Wu Ch., Liu Y., Quinn-Walsh C. M.* Queuing Network Modeling of a Real-Time Psychophysiological Index of Mental Workload-P300 in Event-Related Potential (ERP) // *IEEE Trans. Syst., Man, and Cybern., Pt. A: Systems and Humans.* – 2008. – **38**, No 5. – P. 1068–1084.
10. *Акмеология* / Под ред. А. А. Деркача – Москва: РАГС, 2006. – 424 с.
11. *Єна Т. А.* Гігієнічна і психофізіологічна оцінка професійної діяльності диспетчерів енергосистем // *Укр. журн. з проблем медицини праці.* – 2008. – № 1(13). – С. 13–19.
12. *Єна Т. А., Кальниш В. В.* Професійно важливі якості диспетчерів енергосистем // *Там само.* – 2010. – № 4(24). – С. 11–20.
13. *Kalnysh V. V., Shvets A. V.* Effect of intense 24-hour shift work on reliability of operators' activity // *Human Physiol.* – 2012. – **38**, No 3. – P. 294–302.
14. *Кочина М. Л., Фирсов А. Г.* Многофункциональный прибор для проведения психофизиологических исследований // *Прикл. радиоэлектроника.* – 2010. – **9**, № 2. – С. 260–265.
15. *Lewicki P., Hill Th.* STATISTICS Methods and Applications. A comprehensive reference for science, industry, and data mining. – Tulsa OK, USA: StatSoft Inc., 2006. – 832 p.

*НИИ проблем военной медицины Украинской  
военно-медицинской академии, Киев*

*Поступило в редакцию 23.09.2013*

**В. В. Кальниш, А. В. Швець**

### **Проблема надійності: новий підхід до оцінки якості операторської діяльності**

*Запропоновано новий підхід до визначення надійності операторської діяльності за допомогою побудови профілю надійності кожного оператора при моделюванні інформаційної складової його професійних обов'язків. Показано, що використання профілю надійності операторської діяльності відкриває нові та широкі перспективи в розумінні поведінки людини в різних ситуаціях її професійної діяльності та забезпечує більш точну оцінку надійності роботи.*

**V. V. Kalnysh, A. V. Shvets**

### **The problem of reliability: a new approach to the estimation of operator's activity quality**

*A new approach to the definition of operator's activity reliability using the reliability profile construction for each operator has been offered at the modeling of professional duties' information components. It is shown that the reliability profile usage of operators' activity opens new and wide prospects in the understanding of human behavior within various situations of the professional activity and provides a more exact estimation of the job reliability.*

**В. М. Пушкаръов, О. І. Ковзун, В. В. Пушкаръов,**  
член-кореспондент НАН України **М. Д. Тронько**

## **Дія паклітакселу та інгібітора ядерного фактора NF- $\kappa$ B на пухлини раку щитоподібної залози *in vivo***

*Інгібітор ядерного фактора капа В (NF- $\kappa$ B) дегідроксиметилепоксиквіноміцин (DHMEQ) посилює лікувальний ефект паклітакселу щодо пухлин, які утворюються шляхом ксенотрансплантації клітин анапластичної карциноми щитоподібної залози лінії FRO. У тварин, пролікованих паклітакселом та інгібітором NF- $\kappa$ B, спостерігали зменшення об'єму пухлин, що вірогідно відрізнялося від ефектів кожної зі сполук окремо. Таким чином, комбіноване застосування паклітакселу та інгібітора NF- $\kappa$ B є перспективною стратегією для подальших доклінічних досліджень, що мають за мету розробку нових хіміотерапевтичних підходів для лікування анапластичного раку щитоподібної залози.*

Таксани є ефективними протипухлинними препаратами, що використовуються для лікування деяких видів раку [1]. Проводяться дослідження щодо їх застосування для терапії пухлин щитоподібної залози (ЩЗ) [2], які показали, що паклітаксел або доцетаксел у комбінації з гемцитабіном є найбільш ефективним сполученням [3]. Одержані *in vitro* дані свідчать про те, що паклітаксел активує в пухлинних клітинах не тільки процеси, які спричиняють клітинну смерть, але й механізми, що протидіють загибелі клітин [2]. Тому актуальними є дослідження, які б дали змогу визначити способи інактивації сигнальних каскадів, що беруть участь у формуванні стійкості ракових клітин до цього протипухлинного препарату.

Ядерний транскрипційний фактор NF- $\kappa$ B задіяний у багатьох сигнальних механізмах, що обумовлюють процеси проліферації, диференціації, поділу, виживання та міграції клітин [4]. Порушення його функції призводить до запальних процесів та виникнення ряду захворювань, у тому числі і канцерогенезу [5]. Більше того, саме NF- $\kappa$ B вважають головним посередником, який пов'язує запальні процеси і злякисну трансформацію тканин [6, 7]. Є також дані, що NF- $\kappa$ B проявляє антиапоптозні ефекти та ініціює канцерогенез в карциномах щитоподібної залози [8, 9].

Показано, що паклітаксел посилює активацію та експресію кіназного комплексу ІКК (I $\kappa$ B-кіназа) [10], який призводить до вивільнення фактора NF- $\kappa$ B з неактивного комплексу і транспортування його до ядра. Оскільки фактор NF- $\kappa$ B відіграє важливу роль в антиапоптозних процесах, обумовлює хемо- та радіорезистентність пухлинних клітин [11], очікувалося, що його пригнічення буде посилювати лікувальний ефект паклітакселу в пухлинах.

Мета дослідження полягала у вивченні комбінованої дії паклітакселу та специфічного інгібітора ядерного чинника NF- $\kappa$ B — DHMEQ — щодо росту пухлин, одержаних шляхом ксенотрансплантації трансгенним мишам клітин раку щитоподібної залози лінії FRO.

Препарат DHMEQ був люб'язно наданий доктором К. Умезава (Університет Кейо, Йокогама, Японія). Стоковий розчин рацемату DHMEQ (10 мг/мл) готували на диметилсульфоксиді (ДМСО) і зберігали при  $-20$  °С.

Клітинна лінія FRO була одержана від проф. В. О. Саєнко (Nagasaki University Graduate School of Biomedical Sciences, Нагасакі, Японія), а введена в культуру J. A. Fagin (University

of Cincinnati College of Medicine, Цинциннаті, Огайо, США). Лінія характеризується: мутацією в гені BRAF(600E), відсутністю експресії тироїдного транскрипційного фактора-1 та PAX-8.

Клітини культивували в середовищі RPMI-1640, що містило 5% бичачої сироватки (FBS), пеніцилін/стрептоміцин (100 Од./мл/100 мкг/мл відповідно), в атмосфері з 5% CO<sub>2</sub> при 37 °С протягом 2 діб, промивали два рази PBS-буфером (80 ммоль/л ортофосфат натрію однозаміщений, 20 ммоль/л ортофосфат натрію двоаміщений, 100 ммоль/л хлорид натрію, рН 7,4) і замінювали середовище. Через 24 год вносили розчинений у ДМСО паклітаксел фірми "Wako Chemicals" (Японія) та препарат DHMEQ і інкубували клітини протягом наступних 24 год. У контрольні проби вносили в такій же кількості ДМСО. Визначення життєздатності клітин проводили в 96-лункових планшетах у середовищі RPMI-1640, що містило 5% FBS. Суспензію клітин (приблизно 1000 клітин) вносили в лунки і інкубували протягом 24 год. Паклітаксел та DHMEQ, розчинені в ДМСО, додавали в зростаючих концентраціях, по 6 лунок на кожну концентрацію. Після інкубації визначали кількість живих клітин за допомогою WST-тесту.

Досліди *in vivo* проводили на ксенотрансплантатах. Для цього мишам BALB/c *nu/nu*, яких було розділено на чотири групи, у кожній по дев'ять трансгенних, безтимусних, 8-тижневих за віком самок, підшкірно вводили в стегно задньої лапки суспензію клітин FRO, суспендованих у RPMI-1640 ( $5 \cdot 10^6$  клітин на тварину). Маса тварин становила близько 25 мг. Розмір пухлини замірювали через 1 добу і розраховували за формулою  $a^2 \times b \times 0,4$ , де  $a$  — найменший діаметр пухлини,  $b$  — діаметр пухлини, перпендикулярний до  $a$ . Лікування паклітакселем та DHMEQ починали після того, як розмір пухлин наближався до 100 мм<sup>3</sup>. Препарати паклітакселу (10 мг/кг на добу) і DHMEQ (8 мг/кг на добу) вводили внутрішньочеревно в суміші, що складалася з Cremophor EL ("Sigma", США), етанолу та PBS (1 : 1 : 1). Тваринам контрольної групи вводили в такій же кількості цю суміш без препаратів.

Статистичну обробку даних проводили за Стьюдентом. Значення  $P < 0,05$  вважали за вірогідні.

Вплив ядерного фактора NF- $\kappa$ B на апоптозні процеси в пухлинних клітинах інтенсивно досліджується. Було показано, що фактор активує групу генів, продукти яких гальмують апоптоз шляхом пригнічення каспаз [12]. Тому припускалося, що пригнічення NF- $\kappa$ B інгібітором DHMEQ призведе до посилення цитотоксичного ефекту паклітакселу щодо клітин анапластичного раку щитоподібної залози та трансплантованих пухлин.

Поєднання паклітакселу з DHMEQ призводить до загибелі частини клітин FRO вже через 24 год інкубації (рис. 1). Більш ефективною виявилася комбінація зі зростаючих концентрацій DHMEQ з 5 нмоль/л паклітакселу.

З рис. 2 видно, що підсажені мишам клітини утворюють пухлину, яка досить швидко росте, досягаючи через 7 діб у контрольній групі 350% початкового об'єму пухлини. Лікування тварин інгібітором NF- $\kappa$ B, DHMEQ, призводить до вірогідного гальмування росту пухлини. Паклітаксел виявився ефективнішим *in vivo*. Розмір пухлини зменшувався більш ніж у два рази порівняно з початковим об'ємом, до лікування. Ще ефективнішою була комбінована дія паклітакселу з DHMEQ, в результаті якої об'єм пухлини зменшувався більш ніж у чотири рази. Ефект поєданого лікування обома препаратами вірогідно відрізнявся від дії кожної зі сполук окремо (див. рис. 2).

Отже, комбінована дія паклітакселу та інгібітора NF- $\kappa$ B більшою мірою посилює апоптозні процеси в пухлинах анапластичного раку ЩЗ, ніж кожен з агентів окремо і, таким

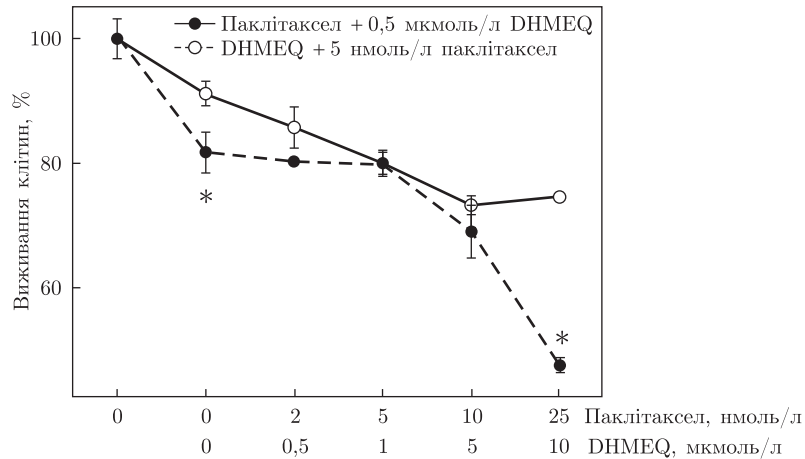


Рис. 1. Ефект комбінованої дії інгібітора NF-κB — DHMEQ та протипухлинного препарату паклітакселу на виживаність клітин анапластичного раку щитоподібної залози.

\* — відміни від відповідної точки іншої кривої вірогідні,  $P < 0,05$ ;  $n = 6$ ,  $M \pm m$

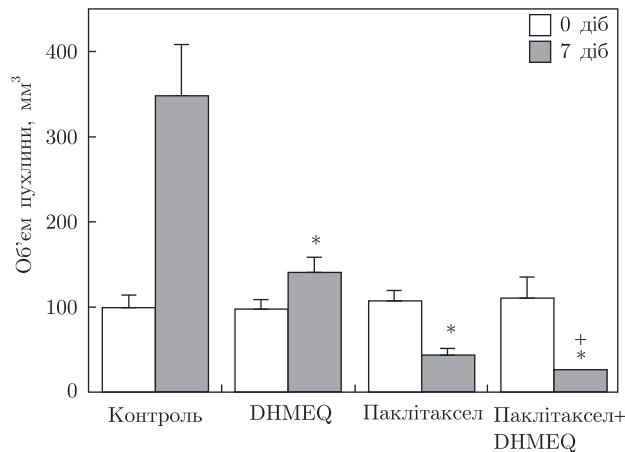


Рис. 2. Ефект комбінованої дії інгібітора NF-κB — DHMEQ та протипухлинного препарату паклітакселу на розмір ксенотрансплантованої трансгенним мишам пухлини анапластичного раку щитоподібної залози.

\* — відміни від контролю (7 доба) вірогідні,  $P < 0,05$ ; + — різниця між ефектом DHMEQ і паклітакселу окремо та їх комбінації вірогідна,  $P < 0,05$ . В досліді використовували 4 групи по 9 тварин,  $M \pm m$

чином, комбінація цих препаратів може бути перспективним варіантом для доклінічних досліджень щодо терапії агресивних, метастатуючих та радіоїдрезистентних форм раку ЩЗ.

1. Jordan M. A., Wilson L. Microtubules as a target for anticancer drugs // *Nat. Rev. Canc.* – 2004. – 4. – P. 253–265.
2. Pushkarev V. M., Starenki D. V., Saenko V. A. et al. Molecular mechanism of the effects of low concentrations of taxol in anaplastic thyroid cancer cells // *Endocrinology*. – 2004. – 145, No 7. – P. 3143–3152.
3. Тронько М. Д., Пушкарьов В. В., Ковзун О. І., Пушкарьов В. М. Анапластична карцинома щитоподібної залози: нові підходи до її лікування // *Ендокринологія*. – 2013. – 18, № 2. – С. 78–91.
4. Orłowski R. Z., Baldwin A. S., jr. NF-κB as a therapeutic target in cancer // *Trends Mol. Med.* – 2002. – 8, No 8. – P. 385–389.
5. Liptay S., Weber C. K., Ludwig L. et al. Mitogenic and antiapoptotic role of constitutive NF-κB/Rel activity in pancreatic cancer // *Int. J. Cancer*. – 2003. – 105. – P. 735–746.
6. Karin M. The IκB kinase – a bridge between inflammation and cancer // *Cell Res.* – 2008. – 18. – P. 334–342.

7. Wang H., Cho C.H. Effect of NF- $\kappa$ B signaling on apoptosis in chronic inflammation-associated carcinogenesis // Curr. Cancer Drug Targets. – 2010. – **10**, No 6. – P. 593–599.
8. Pacifico F., Mauro C., Barone C. et al. Oncogenic and anti-apoptotic activity of NF- $\kappa$ B in human thyroid carcinomas // J. Biol. Chem. – 2004. – **279**, No 52. – P. 54610–54619.
9. Pacifico F., Leonardi A. Role of NF- $\kappa$ B in thyroid cancer // Mol. Cell. Endocrinol. – 2010. – **321**, No 1. – P. 29–35.
10. Ковзун О. І., Пушкарьов В. В. Таксол посилює фосфорилування ізоформ протеїнкінази С та кіназного комплексу ІКК у клітинах анапластичного раку щитовидної залози // Ендокринологія. – 2005. – **10**, № 1. – С. 130–133.
11. Chen W., Li Z., Bai L., Lin Y. NF- $\kappa$ B in lung cancer, a carcinogenesis mediator and a prevention and therapy target // Front. Biosci. – 2011. – **16**. – P. 1172–1185.
12. Luo J. L., Kamata H., Karin M. IKK/NF- $\kappa$ B signaling: balancing life and death – a new approach to cancer therapy // J. Clin. Invest. – 2005. – **115**, No 10. – P. 2625–2632.

ДУ “Інститут ендокринології та обміну речовин  
ім. В. П. Комісаренка НАМН України”, Київ

Надійшло до редакції 23.12.2013

**В. М. Пушкарев, Е. І. Ковзун, В. В. Пушкарев,**  
член-корреспондент НАН України **Н. Д. Тронько**

### **Действие паклитаксела и ингибитора ядерного фактора NF- $\kappa$ B на опухоли рака щитовидной железы *in vivo***

*Ингибитор ядерного фактора каппа В (NF- $\kappa$ B) дегидроксиметилэпоксиквиномицин (DHMEQ) усиливает лечебный эффект паклитаксела относительно опухолей, которые образуются путем ксенотрансплантации клеток анапластической карциномы щитовидной железы линии FRO. У животных, пролеченных паклитакселом и ингибитором NF- $\kappa$ B, наблюдали уменьшение объема опухолей, что достоверно отличалось от эффектов каждого из соединений в отдельности. Таким образом, комбинированное применение паклитаксела и ингибитора NF- $\kappa$ B является перспективной стратегией для дальнейших доклинических исследований, имеющих целью разработку новых химиотерапевтических подходов для лечения анапластического рака щитовидной железы.*

**V. M. Pushkarev, O. I. Kovzun, V. V. Pushkarev,**  
Corresponding Member of the NAS of Ukraine **M. D. Tronko**

### **Effects of paclitaxel and nuclear factor NF- $\kappa$ B inhibitor in thyroid cancer tumors *in vivo***

*Nuclear factor kappa B (NF- $\kappa$ B) inhibitor dehydroxymethyl epoxyquinomicin (DHMEQ) enhances the therapeutic effect of paclitaxel on tumors formed by the xenotransplantation of anaplastic thyroid carcinoma FRO cells. In animals treated with paclitaxel and NF- $\kappa$ B inhibitor, a reduction in the tumor volume was observed, which is significantly different from the effects of each of the compounds in particular. Thus, the combined use of paclitaxel and NF- $\kappa$ B inhibitor is a promising strategy for further preclinical studies for developing the new chemotherapeutic approaches for the anaplastic thyroid cancer treatment.*

## Інформація для авторів журналу «Доповіді Національної академії наук України»

Редакція журналу приймає для публікації повідомлення, що мають *мотивоване представлення* дійсного члена або члена-кореспондента НАН України з відповідної спеціальності. До статті додається супровідний лист організації, в якій виконано дослідження.

Журнал друкує не більше *трьох повідомлень одного автора* на рік. Повідомлення дійсних членів та членів-кореспондентів НАН України друкуються без обмежень.

У разі додаткового рецензування та переробки статті датою надходження вважається дата одержання редакцією її остаточного тексту. Прохання редакції про переробку не означає, що стаття прийнята до друку; після переробки вона знову розглядається редколегією. При відмові в публікації роботи редколегія залишає за собою право не повертати автору один екземпляр статті.

Повідомлення публікуються українською *або* російською мовою. Автор зазначає рубрику, в якій має публікуватися повідомлення, індекс за Універсальною десятиковою класифікацією; в кінці повідомлення наводить повну назву організації, де виконане дослідження, свою поштову і *електронну* адресу та номер телефону. Кожний примірник повідомлення має бути підписаний автором.

Обсяг повідомлення не повинен перевищувати *шести сторінок журналу* (включаючи список літератури — до 15 поз., таблиці, рисунки — до 4).

Фізичні величини наводяться в одиницях СІ. Наукова термінологія повинна відповідати «Російсько-українському словнику наукової термінології» (Київ: Наук. думка. — Т. 1–3. — 1994, 1996, 1998).

*Резюме* українською, російською та англійською мовами *подаються на окремій сторінці* (обов'язково вказати написання прізвищ та назву статті трьома мовами).

*Рукопис* та рисунки (*на окремій сторінці*) слід надсилати у *двох* екземплярах. Текст має бути підготовлений методом комп'ютерного набору та роздрукований на білому папері через 1,5 інтервала на одній стороні аркуша, розмір шрифту 14 пт.

Електронну версію статті автор надсилає на вимогу редакції безпосередньо при підготовці відповідного номеру журналу до друку (термін узгоджується в редакції). Файл статті подається у форматі **ІАТ<sub>Е</sub>X2<sub>ε</sub>** та з результатом трансляції у dvi- чи pdf-файл. **Текст у файлі повинен точно відповідати надрукованому тексту.** Рисунки потрібно записувати окремими файлами у вихідному форматі та у форматі .eps. Для імен файлів використовувати зрозумілі короткі назви, набрані *латинськими* літерами (для статті — прізвище першого автора, для рисунків — rys1, rys2 і т.д.). Статті, що не містять математичних формул, можна подавати в форматі **Word**.

*Список літератури* складається в порядку посилання в тексті; оформлення літературних джерел повинно відповідати вимогам журналу (див. списки літератури в останніх номерах журналу).

*Коректура* статей авторам не надсилається.

Адреса редакції: Україна, 01601, Київ, вул. Терещенківська, 3, тел. (044) 235-12-16

Автор може передплатити номер журналу, в якому надруковано його статтю, у відділенні зв'язку «Укрпошти» (індекс 74137), а також у агенції «Укрінформнаука» (e-mail: [innovation@nas.gov.ua](mailto:innovation@nas.gov.ua); тел./факс: +38(044)239-64-57).