



# ДОПОВІДІ НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

## 5 • 2019

НАУКОВО-ТЕОРЕТИЧНИЙ ЖУРНАЛ • ЗАСНОВАНИЙ У 1939 Р. • ВИХОДИТЬ ЩОМІСЯЦЯ • КИЇВ

REPORTS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE

### Зміст

#### МАТЕМАТИКА

*Ванеєва О.О.* Групоїди еквівалентності класів нелінійних еволюційних рівнянь другого порядку . . . . . **3**

*Barannyk A.F., Barannyk T.A., Yuryk I.I.* On exact solutions of the nonlinear heat equation . . . . . **11**

#### ІНФОРМАТИКА ТА КІБЕРНЕТИКА

*Vedel Ya.I., Denisov S.V., Semenov V.V.* Сходимость брегмановского экстраградиентного метода . . . . . **18**

#### МЕХАНІКА

*Rushchitsky J.J.* Про поверхневу хвилю вздовж циліндричної порожнини в неоднорідному пружному середовищі . . . . . **24**

*Selivanov M.F.* Розв'язання задачі про крайову тріщину з зоною зчеплення шляхом регуляризації сингулярного інтегрального рівняння . . . . . **34**

*Semenyuk M.P., Trach V.M., Zhukova N.B.* Деформування тришарових циліндричних оболонок з трансверсально пружним заповнювачем в околі критичного стиску . . . . . **44**

### Contents

#### MATHEMATICS

*Vaneeva O.O.* Equivalence groupoids of classes of nonlinear second-order evolution equations. . . . . **3**

*Barannyk A.F., Barannyk T.A., Yuryk I.I.* On exact solutions of the nonlinear heat equation . . . . . **11**

#### INFORMATICS AND CYBERNETICS

*Vedel Ya.I., Denisov S.V., Semenov V.V.* Convergence of the Bregman extragradient method . . . . . **18**

#### MECHANICS

*Rushchitsky J.J.* On a surface wave along the cylindrical cavity in an inhomogeneous elastic material . . . . . **24**

*Selivanov M.F.* Solving a problem on an edge crack with cohesive zone by the regularization of a singular integral equation. . . . . **34**

*Semenyuk N.P., Trach V.M., Zhukova N.B.* Deformation of three-layer cylindrical shells with transversally elastic core in a vicinity of the critical compression . . . . . **44**

Хорошун Л.П., Левчук О.И. Эффективные упругие свойства слоистых композитов при не-совершенной адгезии ..... 56

#### ФІЗИКА

Гайдар Г.П. До методології визначення тензопору *n*-Ge та *n*-Si у кристалографічних напрямках  $\langle 110 \rangle$  ..... 67

#### ХІМІЯ

Соломяний Р.М., Броварець В.С., Шаблюкіна О.В., Москвіна В.С., Хиля В.П. 8-(Метилсульфоніл)-2,6-дигідроімідазо[1,2-*c*]піримідин-5(3*H*)-они — нові гетероциклічні похідні сульфонів з противірусною активністю ..... 75

Туров В.В., Геращенко И.И., Крупская Т.В., Степанюк Е.А. Особенности формирования композитной системы полиметилсилоксан/кремнезем/вода в присутствии поверхностно активного вещества — декаметоксина ..... 82

#### БІОЛОГІЯ

Романчук С.М. Вплив X-опромінення на експресію гена  $\beta$ -глюкозидази *PYK 10* в проростках *Arabidopsis thaliana* (L.) Heynh. .... 91

Оврутська І.І., Кордюм Е.Л. *PIP2;1* aquaporin gene expression in maize hybrids different for drought tolerance to water deficit. .... 97

#### МЕДИЦИНА

Вацеба Т.С., Соколова Л.К., Пушкарьов В.В., Ковзун О.І., Пушкарьов В.М., Тронько М.Д. Фосфорилування PRAS40 у лейкоцитах хворих на рак та діабет ..... 102

Khoroshun L.P., Levchuk O.I. Effective elastic properties of layered composites under imperfect adhesion ..... 56

#### PHYSICS

Gaidar G.P. On the methodology of tensor resistance determination for *n*-Ge and *n*-Si in the crystallographic directions  $\langle 110 \rangle$  ..... 67

#### CHEMISTRY

Solomyannyi R.M., Brovarets V.S., Shablykina O.V., Moskvina V.S., Khilya V.P. 8-(Methylsulfonyl)-2,6-dihydroimidazo[1,2-*c*]pyrimidine-5-(3*H*)-ones — new heterocyclic derivatives of sulfones with antiviral activity ..... 75

Turov V.V., Gerashchenko I.I., Krupskaya T.V., Stepanuk K.O. Features of the formation of the composite system polymethylsiloxane/silica/water in the presence of a surfactant — decamethoxine ..... 82

#### BIOLOGY

Romanchuk S.M. The effect of X-irradiation on  $\beta$ -glucosidase *PYK 10* gene expression in *Arabidopsis thaliana* (L.) Heynh. seedlings. .... 91

Ovrutskaya I.I., Kordyum E.L. *P1P2;1* aquaporin gene expression in maize hybrids different for drought tolerance to water deficit. .... 97

#### MEDICINE

Vatseba T.S., Sokolova L.K., Pushkarev V.V., Kovzun O.I., Pushkarev V.M., Tronko M.D. Phosphorylation of PRAS40 in leukocytes of patients with cancer and diabetes ..... 102

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.05.003>

УДК 517.957

**О.О. Ванєєва**

Інститут математики НАН України, Київ

E-mail: [vaneeva@imath.kiev.ua](mailto:vaneeva@imath.kiev.ua)

## Групоїди еквівалентності класів нелінійних еволюційних рівнянь другого порядку

*Представлено членом-кореспондентом НАН України А.Г. Нікітіним*

*Досліджено допустимі перетворення загального класу  $(1+1)$ -вимірних нелінійних еволюційних рівнянь другого порядку. Побудовано ланцюжок вкладених нормалізованих підкласів цього класу. Для цих підкласів побудовано групоїди еквівалентності. Окремо розглянуто два ненормалізовані підкласи рівнянь типу реакції–конвекції–дифузії, що є цікавими для застосувань, і знайдено їх групи еквівалентності.*

**Ключові слова:** *групоїд еквівалентності, допустимі перетворення, група еквівалентності, еволюційні рівняння, рівняння реакції–конвекції–дифузії.*

Допустимим перетворенням у класі диференціальних рівнянь називають впорядковану трійку, що складається з двох рівнянь цього класу та невиродженого точкового перетворення, що відображає перше з цих рівнянь у друге. Множина допустимих перетворень має структуру групоїда відносно операції композиції перетворень, а тому її називають групоїдом еквівалентності [1–3]. Значна частина допустимих перетворень класу генерується перетвореннями еквівалентності, тобто невиродженими точковими перетвореннями незалежних і залежних змінних рівнянь з класу та довільних елементів класу, що зберігають диференціальну структуру класу, але можуть змінювати довільні елементи. Перетворення еквівалентності класу утворюють групу [4]. Якщо перетворення змінних не залежать від довільних елементів, то таку групу називають звичайною. Клас диференціальних рівнянь, групоїд еквівалентності якого породжено звичайною групою еквівалентності, називають нормалізованим у звичайному сенсі [1, 2].

Використання допустимих перетворень дає змогу істотно спростити класифікаційні задачі групового аналізу диференціальних рівнянь, зокрема класифікації різних типів симетрій, побудову локальних законів збереження і точних розв'язків, а також дослідження інтегровності [5–8]. Також важливо, що нормалізовані класи мають простіші трансформаційні властивості і є зручнішими для дослідження. Отже, важливою задачею є пошук групоїдів еквівалентності для класів рівнянь, що є цікавими для застосувань, та дослідження властивості нормалізованості таких класів.

© О.О. Ванєєва, 2019

ISSN 1025-6415. Допов. Нац. акад. наук Укр. 2019. № 5

3

У цій роботі розглянуто загальний клас (1+1)-вимірних нелінійних еволюційних рівнянь другого порядку

$$u_t = H(t, x, u, u_x, u_{xx}), \text{ де } H_{u_{xx}} \neq 0, \quad (1)$$

та досліджено його трансформаційні властивості. Побудовано ланцюжок вкладених нормалізованих підкласів цього класу та знайдено відповідні групоїди еквівалентності. Також розглянуто класи узагальнених рівнянь реакції–дифузії, що є підкласами класу (1), але при цьому не є нормалізованими. Побудовано їх групи еквівалентності.

**Групоїди еквівалентності еволюційних рівнянь.** Добре відомо, що будь-яке невідроджене точкове перетворення між рівняннями  $u_t = H$  та  $\tilde{u}_{\tilde{t}} = \tilde{H}$  з класу (1) має вигляд  $\tilde{t} = T(t)$ ,  $\tilde{x} = X(t, x, u)$ ,  $\tilde{u} = U(t, x, u)$ , задовольняє умову  $T_t(X_x U_u - X_u U_x) \neq 0$  і продовжується на частинні похідні за ланцюговим правилом:

$$\tilde{u}_{\tilde{t}} = \frac{D_t U D_x X - D_x U D_t X}{T_t D_x X}, \quad \tilde{u}_{\tilde{x}} = \frac{D_x U}{D_x X}, \quad \tilde{u}_{\tilde{x}\tilde{x}} = \frac{1}{D_x X} D_x \left( \frac{D_x U}{D_x X} \right),$$

де  $D_t = \partial_t + u_t \partial_u + u_{tt} \partial_{u_t} + u_{tx} \partial_{u_x} + \dots$  та  $D_x = \partial_x + u_x \partial_u + u_{tx} \partial_{u_t} + u_{xx} \partial_{u_x} + \dots$  — оператори повної похідної за змінними  $t$  та  $x$  [9, 10]. Нормалізованість класу (1) встановлено в роботі [11]. Зокрема, справедлива

**Теорема 1** [11]. *Клас (1) є нормалізованим у звичайному сенсі. Його групу еквівалентності складають перетворення*

$$\tilde{t} = T(t), \quad \tilde{x} = X(t, x, u), \quad \tilde{u} = U(t, x, u), \text{ де } T_t(X_x U_u - X_u U_x) \neq 0, \quad (2)$$

$$\tilde{H} = \frac{X_x U_u - X_u U_x}{T_t D_x X} H + \frac{U_t D_x X - X_t D_x U}{T_t D_x X}. \quad (3)$$

Тут і далі всі функції є довільними гладкими функціями своїх аргументів, що задовольняють лише явно вказані додаткові умови.

Підклас квазілінійних еволюційних рівнянь можна виокремити з усього класу (1) умовою  $H_{u_{xx}u_{xx}} = 0$ , з якої випливає, що в цьому випадку можна репараметризувати клас (1), беручи дві інші функції як довільні елементи. Справедлива

**Теорема 2.** *Клас квазілінійних еволюційних рівнянь другого порядку*

$$u_t = G(t, x, u, u_x)u_{xx} + F(t, x, u, u_x), \quad G \neq 0,$$

є нормалізованим у звичайному сенсі. Його групу еквівалентності утворюють невідроджені точкові перетворення, де компоненти для змінних мають вигляд (2), а довільні елементи перетворюються таким чином:

$$\begin{aligned} \tilde{G} &= \frac{(D_x X)^2}{T_t} G, \\ \tilde{F} &= \frac{X_x U_u - X_u U_x}{T_t D_x X} F + \frac{U_t D_x X - X_t D_x U}{T_t D_x X} + \\ &+ \frac{(X_{xx} + 2X_{xu}u_x + X_{uu}u_x^2)D_x U - (U_{xx} + 2U_{xu}u_x + U_{uu}u_x^2)D_x X}{T_t D_x X} G. \end{aligned}$$

Оскільки  $D_x X = X_x + X_u u_x$ , з вигляду компоненти перетворень для довільного елемента  $G$  випливає, що  $X_u = 0$ , якщо  $G$  не залежить від  $u_x$ . Доведено більш строгі твердження, ніж лема 2, наведена в роботі [12].

**Теорема 3.** *Клас рівнянь*

$$u_t = G(t, x, u)u_{xx} + F(t, x, u, u_x), \quad G \neq 0, \quad (4)$$

є нормалізованим у звичайному сенсі. Його групу еквівалентності складають перетворення

$$\tilde{t} = T(t), \quad \tilde{x} = X(t, x), \quad \tilde{u} = U(t, x, u), \quad \tilde{G} = \frac{X_x^2}{T_t} G, \quad (5)$$

$$\tilde{F} = \frac{U_u}{T_t} F + \frac{U_t X_x - X_t D_x U}{T_t X_x} + \frac{X_{xx} D_x U - (U_{xx} + 2U_{xu} u_x + U_{uu} u_x^2) X_x}{T_t X_x} G,$$

де  $T_t X_x U_u \neq 0$ .

Важливим підкласом класу (4) є підклас, де функція  $F$  є поліномом степеня  $n$  за змінною  $u_x$ , а особливо, коли  $F$  є квадратичною або лінійною функцією цієї змінної. Справедлива

**Теорема 4.** *Клас рівнянь вигляду*

$$u_t = G(t, x, u)u_{xx} + \sum_{k=0}^n F^k(t, x, u)u_x^k,$$

де  $n \geq 2, G \neq 0$ , є нормалізованим у звичайному сенсі. Його групу еквівалентності складають перетворення, де компоненти для змінних  $t, x, u$  та довільного елемента  $G$  мають вигляд (5), а компоненти для довільних елементів  $F^k, k=0, \dots, n$ , є розв'язками алгебраїчної системи рівнянь, що відрізняється для кожного фіксованого значення  $n$  і виникає після розщеплення рівняння

$$\sum_{k=0}^n \tilde{F}^k \left( \frac{U_u}{X_x} u_x + \frac{U_x}{X_x} \right)^k = \frac{1}{T_t X_x} \left[ X_x U_u \sum_{k=0}^n F^k u_x^k + U_t X_x - X_t D_x U + (X_{xx} D_x U - (U_{xx} + 2U_{xu} u_x + U_{uu} u_x^2) X_x) G \right]$$

за різними степенями  $u_x$ .

Для фіксованих значень  $n$  усі формули перетворень довільних елементів можна виписати в явному вигляді. Розглянемо окремо важливі випадки, коли  $n=2$  та  $n=1$ . Доведена

**Теорема 5.** *Клас*

$$u_t = G(t, x, u)u_{xx} + F^2(t, x, u)u_x^2 + F^1(t, x, u)u_x + F^0(t, x, u), \quad G \neq 0, \quad (6)$$

є нормалізованим у звичайному сенсі. Його групу еквівалентності складають перетворення

$$\tilde{t} = T(t), \quad \tilde{x} = X(t, x), \quad \tilde{u} = U(t, x, u), \quad \tilde{G} = \frac{X_x^2}{T_t} G, \quad \tilde{F}^2 = \frac{X_x^2}{T_t U_u^2} (U_u F^2 - U_{uu} G),$$

$$\tilde{F}^1 = \frac{1}{T_t U_u} \left( 2 \frac{X_x U_x}{U_u} (U_{uu} G - U_u F^2) + X_x U_u F^1 - X_t U_u + (X_{xx} U_u - 2U_{xu} X_x) G \right),$$

$$\tilde{F}^0 = \frac{1}{T_t} \left[ \frac{U_x^2}{U_u} F^2 - U_x F^1 + U_u F^0 + U_t + \left( 2 \frac{U_x}{U_u} U_{xu} - U_{xx} - \frac{U_x^2}{U_u^2} U_{uu} \right) G \right],$$

де  $T_t X_x U_u \neq 0$ .

Розглянемо підклас класу (6), який виокремлено умовою  $F^2 = 0$ . Його група еквівалентності є підходящою підгрупою класу (6). Обмеження на перетворення знаходимо, покладаючи  $\tilde{F}^2 = 0$  та  $F^2 = 0$  в теоремі 5. Це призводить до умови  $U_{uu} = 0$ . Справедлива

**Теорема 6.** *Клас рівнянь вигляду*

$$u_t = G(t, x, u) u_{xx} + F^1(t, x, u) u_x + F^0(t, x, u), \quad G \neq 0, \quad (7)$$

є нормалізованим у звичайному сенсі. Його групу еквівалентності утворюють перетворення

$$\begin{aligned} \tilde{t} &= T(t), \quad \tilde{x} = X(t, x), \quad \tilde{u} = U^1(t, x)u + U^0(t, x), \quad T_t X_x U^1 \neq 0, \\ \tilde{G} &= \frac{X_x^2}{T_t} G, \quad \tilde{F}^1 = \frac{1}{T_t U^1} (X_x U^1 F^1 - X_t U^1 + (X_{xx} U^1 - 2U_x^1 X_x) G), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\tilde{F}^0 = \frac{1}{T_t} \left[ U^1 F^0 - (U_x^1 u + U_x^0) F^1 + U_t^1 u + U_t^0 + \left( 2 \frac{U_x^1}{U^1} (U_x^1 u + U_x^0) - U_{xx}^1 u - U_{xx}^0 \right) G \right].$$

Розглянемо ще один підклас класу (6), для якого умова  $U_{uu} = 0$  також вірна для допустимих перетворень. Це підклас, виокремлений умовою  $F^2 = G_u$ , вигляду

$$u_t = (G(t, x, u) u_x)_x + K(t, x, u) u_x + P(t, x, u), \quad G \neq 0. \quad (9)$$

Рівняння з класу (9) можна подати у вигляді  $u_t = Gu_{xx} + G_u u_x^2 + (G_x + K)u_x + P$ , де зв'язки між довільними елементами цього класу та класу (6) задаються формулами  $F^2 = G_u$ ,  $F^1 = G_x + K$  та  $F^0 = P$ . Оскільки рівняння з класу (9) містять похідні довільного елемента  $G$ , вони природно виникають у компонентах перетворень еквівалентності для довільних елементів. Таку групу еквівалентності можна вважати звичайною, якщо розширити набір довільних елементів похідними  $G_x$  та  $G_u$  і продовжити перетворення з групи на ці нові довільні елементи

$$\tilde{G}_{\tilde{x}} = \frac{X_x}{T_t} G_x + 2 \frac{X_{xx}}{T_t} G, \quad \tilde{G}_{\tilde{u}} = \frac{X_x^2}{T_t U^1} G_u.$$

Це легко пояснити, якщо зобразити клас (9) у вигляді  $u_t = Gu_{xx} + G^1 u_x^2 + (G^2 + K)u_x + P$  з додатковими довільними елементами  $G^1 = G_u$  та  $G^2 = G_x$ . Для такого репараметризованого класу перетворення еквівалентності вже не містять похідні довільних елементів.

**Теорема 7.** *Клас (9) після репараметризації є нормалізованим у звичайному сенсі. Його групу еквівалентності складають перетворення*

$$\begin{aligned} \tilde{t} &= T(t), \quad \tilde{x} = X(t, x), \quad \tilde{u} = U^1(t, x)u + U^0(t, x), \quad T_t X_x U^1 \neq 0, \\ \tilde{G} &= \frac{X_x^2}{T_t} G, \quad \tilde{K} = \frac{X_x}{T_t} \left[ K - \left( \frac{X_{xx}}{X_x} + 2 \frac{U_x^1}{U^1} \right) G - 2(U_x^1 u + U_x^0) \frac{G_u}{U^1} - \frac{X_t}{X_x} \right], \end{aligned}$$

$$\tilde{P} = \frac{1}{T_t} \left[ U^1 P + \frac{(U_x^1 u + U_x^0)^2}{U^1} G_u - (U_x^1 u + U_x^0) (G_x + K) + U_t^1 u + U_t^0 + \left( 2 \frac{U_x^1}{U^1} (U_x^1 u + U_x^0) - U_{xx}^1 u - U_{xx}^0 \right) G \right].$$

Підклас класу (9), виокремлений умовою  $K = 0$ , має вигляд

$$u_t = (G(t, x, u)u_x)_x + P(t, x, u), \quad G \neq 0. \quad (10)$$

Цей клас не є нормалізованим на відміну від усіх класів, розглянутих до цього. Обмеження на вигляд допустимих перетворень у класі (10) можна отримати, якщо покласти  $K = 0$  та  $\tilde{K} = 0$  в перетвореннях, наведених у теоремі 7. У результаті отримуємо рівняння

$$2 \left( \frac{U_x^1}{U^1} u + \frac{U_x^0}{U^1} \right) G_u + \left( \frac{X_{xx}}{X_x} + 2 \frac{U_x^1}{U^1} \right) G + \frac{X_t}{X_x} = 0.$$

Подальші обмеження на вигляд функцій  $X$ ,  $U^1$  та  $U^0$  залежать від значень функції  $G$ . Якщо ця функція не задовольняє рівняння  $(au + b)G_u + cG + d = 0$ , де  $a, b, c$  та  $d$  – функції, що залежать від  $t$  та  $x$ , то точкові перетворення між рівняннями з цього класу задовольняють умови  $X_t = X_{xx} = U_x^1 = U_x^0 = 0$ , а такий підклас класу (10) є нормалізованим у звичайному сенсі. Доведена

**Теорема 8.** Група еквівалентності класу (10) є звичайною і складається з перетворень

$$\tilde{t} = T(t), \quad \tilde{x} = \delta_1 x + \delta_2, \quad \tilde{u} = U^1(t)u + U^0(t), \quad T_t U^1 \delta_1 \neq 0, \quad \tilde{G} = \frac{\delta_1^2}{T_t} G, \quad \tilde{P} = \frac{1}{T_t} (U^1 P + U_t^1 u + U_t^0).$$

Класи еволюційних рівнянь зі змінним коефіцієнтом біля  $u_t$  часто виникають у застосуваннях. Тому розглянемо узагальнення рівнянь (9) вигляду

$$S(t, x)u_t = (G(t, x, u)u_x)_x + K(t, x, u)u_x + P(t, x, u), \quad SG \neq 0. \quad (11)$$

Зокрема, підкласами цього класу є рівняння реакції–дифузії зі змінними коефіцієнтами вигляду  $f(x)u_t = (g(x)A(u)u_x)_x + h(x)B(u)$  та рівняння конвекції–дифузії зі змінними коефіцієнтами  $f(x)u_t = (g(x)A(u)u_x)_x + h(x)B(u)u_x$ . Рівняння з таких класів моделюють багато фізичних, хімічних та біологічних процесів реального світу.

Хоча коефіцієнт  $S(t, x)$  можна відкалібрувати в одиницю сім'єю точкових перетворень

$$\tilde{t} = t, \quad \tilde{x} = \int_{x_0}^x S(t, y) dy, \quad \tilde{u} = u,$$

клас (11) розглянуто окремо, оскільки його трансформаційні властивості є більш складними, ніж у класу (9). Справедлива

**Теорема 9.** Будь-яке точкове перетворення між двома рівняннями з класу (11) має вигляд (8). Тоді відповідні довільні елементи пов'язані формулами

$$\frac{\tilde{G}}{\tilde{S}} = \frac{X_x^2}{T_t} \frac{G}{S}, \quad \frac{\tilde{K} + \tilde{G}_{\tilde{x}}}{\tilde{S}} = \frac{X_x}{T_t S} \left[ K + G_x + \left( \frac{X_{xx}}{X_x} - 2 \frac{U_x^1}{U^1} \right) G - 2(U_x^1 u + U_x^0) \frac{G_u}{U^1} - \frac{X_t}{X_x} S \right],$$

$$\frac{\tilde{P}}{\tilde{S}} = \frac{1}{T_t S} \left[ U^1 P + \frac{(U_x^1 u + U_x^0)^2}{U^1} G_u - (U_x^1 u + U_x^0)(K + G_x) + (U_t^1 u + U_t^0) S + \left( 2 \frac{U_x^1}{U^1} (U_x^1 u + U_x^0) - U_{xx}^1 u - U_{xx}^0 \right) G \right].$$

Бачимо, що для класу (11) компоненти перетворень з групи еквівалентності для довільних елементів визначені лише для відношень цих елементів. Це можна пояснити наявністю специфічного калібрувального перетворення еквівалентності, яке не змінює незалежні і залежні змінні, а змінює лише вигляд довільних елементів класу. Це перетворення має вигляд

$$\tilde{S} = Z(t, x, S), \quad \tilde{G} = \frac{G}{S} Z, \quad \tilde{K} = \frac{K}{S} Z - G \left( \frac{Z}{S} \right)_x, \quad \tilde{P} = \frac{P}{S} Z,$$

де  $Z$  — довільна гладка функція своїх змінних,  $Z_S \neq 0$ . Доведена

**Теорема 10.** Групу еквівалентності класу (11) складають перетворення

$$\tilde{t} = T(t), \quad \tilde{x} = X(t, x), \quad \tilde{u} = U^1(t, x)u + U^0(t, x),$$

$$T_t X_x U^1 \neq 0, \quad \tilde{S} = Z(t, x, S), \quad \tilde{G} = \frac{X_x^2}{T_t} \frac{G}{S} Z,$$

$$\tilde{K} = \frac{X_x Z}{T_t S} \left[ K - \left( \frac{X_{xx}}{X_x} + 2 \frac{U_x^1}{U^1} \right) G - 2(U_x^1 u + U_x^0) \frac{G_u}{U^1} - \frac{X_t}{X_x} S \right] - \frac{X_x}{T_t} G \left( \frac{Z}{S} \right)_x,$$

$$\tilde{P} = \frac{Z}{T_t S} \left[ U^1 P + \frac{(U_x^1 u + U_x^0)^2}{U^1} G_u - (U_x^1 u + U_x^0)(K + G_x) + (U_t^1 u + U_t^0) S + \left( 2 \frac{U_x^1}{U^1} (U_x^1 u + U_x^0) - U_{xx}^1 u - U_{xx}^0 \right) G \right].$$

Клас (11) можна вважати нормалізованим у звичайному сенсі, оскільки його можна подати у вигляді  $Su_t = Gu_{xx} + G^1 u_x^2 + G^2 u_x + P$  з додатковими довільними елементами  $G^1 = G_u$  та  $G^2 = K + G_x$ . Зауважимо, що підклас класу (11), який виокремлено умовою  $K = 0$ , тобто клас

$$S(t, x)u_t = (G(t, x, u)u_x)_x + P(t, x, u), \quad SG \neq 0, \tag{12}$$

не є нормалізованим. На відміну від класу (11), для класу (12) коефіцієнт  $S$  є суттєвим.

Калібрувальні перетворення еквівалентності досить прості у цьому випадку, а саме: кожен коефіцієнт можна домножувати на ненульову гладку функцію змінної  $t$ . Група еквівалентності класу (12) ширша за групу еквівалентності його підкласу з  $S = 1$ . Справедлива

**Теорема 11.** Групу еквівалентності класу (12) складають перетворення

$$\tilde{t} = T(t), \quad \tilde{x} = X(x), \quad \tilde{u} = U^1(t)u + U^0(t), \quad T_t X_x U^1 \neq 0,$$

$$\tilde{S} = \psi(t) \frac{T_t}{X_x} S, \quad \tilde{G} = \psi(t) X_x G, \quad \tilde{P} = \frac{\Psi(t)}{X_x} (U^1 P + (U_t^1 u + U_t^0) S).$$



Отже, побудовано ланцюжок вкладених підкласів загального класу  $(1+1)$ -вимірних нелінійних еволюційних рівнянь другого порядку. Для цих підкласів знайдено групи еквівалентності. Доведено, що всі розглянуті підкласи, крім двох, є нормалізованими, а тому для всіх нормалізованих підкласів вичерпно описано їх групоїди еквівалентності. Отримані результати можуть бути застосовані у груповому аналізі диференціальних рівнянь, зокрема для пошуку різних типів симетрій, законів збереження та точних розв'язків.

Автор висловлює вдячність *д-ру фіз.-мат. наук, проф. Р.О. Поповичу за цінні зауваження до роботи.*

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Popovych R.O. Classification of admissible transformations of differential equations. *Collection of Works of Institute of Mathematics*. 2006. **3**, № 2. P. 239–254.
2. Popovych R.O., Kunzinger M., Eshraghi H. Admissible transformations and normalized classes of nonlinear Schrödinger equations. *Acta Appl. Math.* 2010. **109**. P. 315–359. doi: <https://doi.org/10.1007/s10440-008-9321-4>
3. Popovych R.O., Bihlo A. Symmetry preserving parametrization schemes. *J. Math. Phys.* 2012. **53**, № 7. 073102, 36 p. doi: <https://doi.org/10.1063/1.4734344>
4. Овсянников Л. В. Групповой анализ дифференциальных уравнений. Москва: Наука, 1978. 400 с.
5. Vaneeva O.O., Popovych R.O., Sophocleous C. Equivalence transformations in the study of integrability. *Phys. Scr.* 2014. **89**, № 3. 038003, 9 p. doi: <https://doi.org/10.1088/0031-8949/89/03/038003>
6. Ванєєва О.О., Жалій О.Ю. Груповий аналіз класу рівнянь реакції–дифузії зі змінними коефіцієнтами. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2014. № 10. С. 12–20. doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2014.10.012>
7. Vaneeva O., Boyko V., Zhaliy A., Sophocleous C. Classification of reduction operators and exact solutions of variable coefficient Newell–Whitehead–Segel equations. *J. Math. Anal. Appl.* 2019. **474**, № 1. P. 264–275. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmaa.2019.01.044>
8. Vaneeva O., Pošta S. Equivalence groupoid of a class of variable coefficient Korteweg–de Vries equations. *J. Math. Phys.* 2017. **58**, № 10. 101504, 12 p. doi: <https://doi.org/10.1063/1.5004973>
9. Kingston J.G. On point transformations of evolution equations. *J. Phys. A: Math. Gen.* 1991. **24**, № 14. P. L769–L774. doi: <https://doi.org/10.1088/0305-4470/24/14/003>
10. Kingston J.G., Sophocleous C. On form-preserving point transformations of partial differential equations. *J. Phys. A: Math. Gen.* 1998. **31**, № 6. P. 1597–1619. doi: <https://doi.org/10.1088/0305-4470/31/6/010>
11. Popovych R.O., Samoilenko A.M. Local conservation laws of second-order evolution equations. *J. Phys. A: Math. Theor.* 2008. **41**, № 36. 362002, 11 p. doi: <https://doi.org/10.1088/1751-8113/41/36/362002>
12. Popovych R.O., Ivanova N.M. New results on group classification of nonlinear diffusion-convection equations. *J. Phys. A: Math. Gen.* 2004. **37**, № 30. P. 7547–7565. doi: <https://doi.org/10.1088/0305-4470/37/30/011>

Надійшло до редакції 11.03.2019

#### REFERENCES

1. Popovych, R. O. (2006). Classification of admissible transformations of differential equations. *Collection of Works of Institute of Mathematics*, 3, No. 2, pp. 239-254.
2. Popovych, R. O., Kunzinger, M. & Eshraghi, H. (2010). Admissible transformations and normalized classes of nonlinear Schrödinger equations. *Acta Appl. Math.*, 109, pp. 315-359. doi: <https://doi.org/10.1007/s10440-008-9321-4>
3. Popovych, R. O. & Bihlo, A. (2012). Symmetry preserving parametrization schemes. *J. Math. Phys.*, 53, No. 7, 073102, 36 p. doi: <https://doi.org/10.1063/1.4734344>
4. Ovsianikov, L. V. (1978). *Group analysis of differential equations*. Moscow: Nauka (in Russian).
5. Vaneeva, O. O., Popovych, R. O. & Sophocleous, C. (2014). Equivalence transformations in the study of integrability. *Phys. Scr.*, 89, No. 3, 038003, 9 p. doi: <https://doi.org/10.1088/0031-8949/89/03/038003>

6. Vaneeva, O. O. & Zhalij, O. Yu. (2014). Group analysis of a class of reaction-diffusion equations with variable coefficients. *Dopov. Nac. akad. nauk. Ukr.*, No. 10, pp. 12-20 (in Ukrainian). doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2014.10.012>
7. Vaneeva, O., Boyko, V., Zhalij, A. & Sophocleous, C. (2019). Classification of reduction operators and exact solutions of variable coefficient Newell–Whitehead–Segel equations. *J. Math. Anal. Appl.*, 474, No. 1, pp. 264-275. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmaa.2019.01.044>
8. Vaneeva, O. & Pošta, S. (2017). Equivalence groupoid of a class of variable coefficient Korteweg–de Vries equations. *J. Math. Phys.*, 58, No. 10, 101504, 12 p. doi: <https://doi.org/10.1063/1.5004973>
9. Kingston, J. G. (1991). On point transformations of evolution equations. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 24, No. 14, pp. L769-L774. doi: <https://doi.org/10.1088/0305-4470/24/14/003>
10. Kingston, J. G. & Sophocleous, C. (1998). On form-preserving point transformations of partial differential equations. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 31, No. 6, pp. 1597-1619. doi: <https://doi.org/10.1088/0305-4470/31/6/010>
11. Popovych, R. O. & Samoilenko, A. M. (2008). Local conservation laws of second-order evolution equations. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 41, No. 36, 362002, 11 p. doi: <https://doi.org/10.1088/1751-8113/41/36/362002>
12. Popovych, R. O. & Ivanova, N. M. (2004). New results on group classification of nonlinear diffusion-convection equations. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 37, No. 30, pp. 7547-7565. doi: <https://doi.org/10.1088/0305-4470/37/30/011>

Received 11.03.2019

Е.А. Ванеева

Институт математики НАН Украины, Киев

E-mail: [vaneeva@imath.kiev.ua](mailto:vaneeva@imath.kiev.ua)

#### ГРУППОИДЫ ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ КЛАССОВ НЕЛИНЕЙНЫХ ЭВОЛЮЦИОННЫХ УРАВНЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Исследованы допустимые преобразования общего класса  $(1+1)$ -мерных нелинейных эволюционных уравнений второго порядка. Построена цепочка вложенных нормализованных подклассов этого класса. Для этих подклассов построены группоиды эквивалентности. Отдельно рассмотрены два ненормализованных подкласса уравнений типа реакции–конвекции–диффузии, которые интересны для приложений и найдены их группы эквивалентности.

**Ключевые слова:** *группоид эквивалентности, допустимые преобразования, группа эквивалентности, эволюционные уравнения, уравнения реакции–конвекции–диффузии.*

О.О. Vaneeva

Institute of Mathematics of the NAS of Ukraine, Kiev

E-mail: [vaneeva@imath.kiev.ua](mailto:vaneeva@imath.kiev.ua)

#### EQUIVALENCE GROUPOIDS OF CLASSES OF NONLINEAR SECOND-ORDER EVOLUTION EQUATIONS

We study transformational properties of the general class of  $(1+1)$ -dimensional nonlinear second-order evolution equations. The chain of nested normalized subclasses of this class is constructed. The equivalence groupoids of the respective normalized subclasses are found. For two subclasses that are of interest for applications, but not normalized, the equivalence groups are derived.

**Keywords:** *equivalence groupoid, admissible transformations, equivalence group, evolution equations, reaction–diffusion–convection equations.*

**A.F. Barannyk<sup>1</sup>, T.A. Barannyk<sup>2</sup>, I.I. Yuryk<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> Institute of Mathematics, Pomeranian University, Słupsk, Poland

<sup>2</sup> Poltava V.G. Korolenko National Pedagogical University

<sup>3</sup> National University of Food Technologies, Kiev

E-mail: anatolij.barannyk@apsl.edu.pl, barannykt@rambler.ru, i.yu@ukr.net

## On exact solutions of the nonlinear heat equation

*Presented by Corresponding Member of the NAS of Ukraine A.G. Nikitin*

*A method for construction of exact solutions to the nonlinear heat equation  $u_t = (F(u)u_x)_x + G(u)u_x + H(u)$ , which is based on the ansatz  $p(x) = \omega_1(t)\varphi(u) + \omega_2(t)$ , is proposed. The function  $p(x)$  is a solution of the equation  $(p')^2 = Ap^2 + B$ , and the functions  $\omega_1(t)$ ,  $\omega_2(t)$  and  $\varphi(u)$  can be found from the condition that this ansatz reduces the nonlinear heat equation to a system of two ordinary differential equations with unknown functions  $\omega_1(t)$  and  $\omega_2(t)$ .*

**Keywords:** *group-theoretic methods, exact solutions, nonlinear heat equation, generalized variable separation.*

**1. Introduction.** The paper is devoted to the construction of exact solutions of the nonlinear heat equation

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ F(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right] + G(u) \frac{\partial u}{\partial x} + H(u). \quad (1)$$

This equation for  $G(u) \equiv \text{const}$  describes the unsteady state heat transfer in a medium that is moving with a constant velocity, where the thermal conductivity coefficient and the reaction speed coefficient are arbitrary functions of the temperature. The soliton solutions of Eq. (1) are presented in [1].

In the case  $G(u) \equiv 0$ , we have

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ F(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right] + H(u), \quad (2)$$

which describes the unsteady state heat transfer in an unmovable medium. The group classification of a class of equations of this type and exact solutions for different functions  $F(u)$  and  $H(u)$  are presented in [1–5].

In this paper, we propose a method for constructing new exact solutions of Eqs. (1) and (2). To solve these equations, we use the ansatz

$$p(x) = \omega_1(t)\varphi(u) + \omega_2(t), \quad (3)$$

which contains the unknown functions  $\omega_1(t)$ ,  $\omega_2(t)$ , and  $\varphi(u)$ , whereas the function  $p(x)$  is *a priori* predefined. Assume that  $p(x)$  is a solution of the equation

$$(p')^2 = Ap^2 + B,$$

and then determine the functions  $\omega_1(t)$ ,  $\omega_2(t)$ , and  $\varphi(u)$ , using the reduction idea. Namely, assume that ansatz (3) reduces the given equation to a system of two ordinary differential equations with unknown functions  $\omega_1(t)$  and  $\omega_2(t)$ . This approach gives a description of a class of equations of the forms (1) and (2) that have solutions of the form (3), as well as an effective technique for constructing such solutions. An ansatz of the form (3) is used in [6, 7] for constructing exact solutions of nonlinear wave equations and Korteweg–de Vries equations.

**2. Exact solutions of Eq. (1).** In this section, we determine the functions  $F(u)$ ,  $G(u)$ , and  $H(u)$ , for which Eq. (1) has solutions of the form

$$x = \omega_1(t)\varphi(u) + \omega_2(t), \tag{4}$$

i.e. admits ansatz (4). This ansatz contains the three unknown functions  $\omega_1(t)$ ,  $\omega_2(t)$ , and  $\varphi(u)$ . These functions will be determined from the condition that ansatz (4) reduces Eq. (1) to a system of two ordinary differential equations with the unknown functions  $\omega_1(t)$  and  $\omega_2(t)$ . In order to obtain this system, we substitute relation (4) into Eq. (1):

$$-\frac{\omega_1' \varphi}{\omega_1 \varphi'} - \frac{\omega_2' \frac{1}{\varphi}}{\omega_1 \varphi'} = \left( -F \frac{\varphi''}{(\varphi')^3} + F' \frac{1}{(\varphi')^2} \right) \frac{1}{\omega_1^2} + \frac{1}{\omega_1} \frac{G}{\varphi'} + H(u), \tag{5}$$

If there exists a solution of Eq. (1) of the form (4), then the obtained Eq. (5) means that the functions

$$\frac{\varphi}{\varphi'}, \frac{1}{\varphi'}, -F \frac{\varphi''}{(\varphi')^3} + F' \frac{1}{(\varphi')^2}, \frac{G}{\varphi'}, H \tag{6}$$

are linearly dependent. The functions  $\frac{\varphi}{\varphi'}$ ,  $\frac{1}{\varphi'}$  are linearly independent, so all other functions (6) should obey the condition that they are representable as a linear combination of the functions  $\frac{\varphi}{\varphi'}$ ,  $\frac{1}{\varphi'}$ . We have

$$-F \frac{\varphi''}{(\varphi')^3} + F' \frac{1}{(\varphi')^2} = \lambda_1 \frac{\varphi}{\varphi'} + \mu_1 \frac{1}{\varphi'}, \tag{7}$$

$$G = \lambda_2 \varphi + \mu_2, \tag{8}$$

$$H = \lambda_3 \frac{\varphi}{\varphi'} + \mu_3 \frac{1}{\varphi'}, \tag{9}$$

for some  $\lambda_i, \mu_i \in R$ . Substitute (7)–(9) into Eq. (5):

$$\left( -\frac{\omega_1'}{\omega_1} - \frac{\lambda_1}{\omega_1^2} - \frac{\lambda_2}{\omega_1} - \lambda_3 \right) \frac{\varphi}{\varphi'} + \left( -\frac{\omega_2'}{\omega_1} - \frac{\mu_1}{\omega_1^2} - \frac{\mu_2}{\omega_1} - \mu_3 \right) \frac{1}{\varphi'} = 0. \tag{10}$$

The functions  $\frac{\varphi}{\varphi'}$  and  $\frac{1}{\varphi'}$  are linearly independent, so Eq. (10) splits into a system of equations

$$\frac{\omega_1'}{\omega_1} + \frac{\lambda_1}{\omega_1^2} + \frac{\lambda_2}{\omega_1} + \lambda_3 = 0, \tag{11}$$

$$\frac{\omega_2'}{\omega_1} + \frac{\mu_1}{\omega_1^2} + \frac{\mu_2}{\omega_1} + \mu_3 = 0. \tag{12}$$

Let  $F'(u) \neq 0$ . Integrating Eq. (7), which is linear with respect to the function  $F = F(u)$ , we find

$$F = (\lambda_1 \int \varphi du + \mu_1 u + A) \varphi', \tag{13}$$

where A is an arbitrary constant. As a result, we can formulate the following theorem.

**Theorem 1.** *Let  $F'(u) \neq 0$  in Eq. (1). If Eq. (1) admits ansatz (4), then the functions  $F(u)$ ,  $G(u)$ , and  $H(u)$  are defined by formulas (13), (8), and (9), respectively, whereas  $\omega_1(t)$  and  $\omega_2(t)$  are solutions of the system of equations (11), (12).*

In accordance with Theorem 1, the function  $\varphi(u)$  in ansatz (4) is arbitrary, whereas the functions  $F(u)$ ,  $G(u)$ , and  $H(u)$  can be represented via the function  $\varphi(u)$ . Finding solutions of the form (4) of Eq. (1) is reduced to integrating the system of equations (11), (12). Rewrite this system in terms of new functions  $v_1$  and  $v_2$ ,

$$v_1 = \frac{1}{\omega_1}, \quad v_2 = \frac{\omega_2}{\omega_1}.$$

Then this system transforms to

$$v_1' = \lambda_1 v_1^3 + \lambda_2 v_1^2 + \lambda_3 v_1, \tag{14}$$

$$v_2' = (\lambda_1 v_1^2 + \lambda_2 v_1 + \lambda_3) v_2 + \mu_1 v_1^2 + \mu_2 v_1 + \mu_3. \tag{15}$$

Consider three possible cases.

a) Case  $\lambda_1 \neq 0, \lambda_2 = \lambda_3 = 0$ . Equation (1) has the form

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ F(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \mu_2 \frac{\partial u}{\partial x} + \mu_3 \frac{1}{\varphi}, \tag{16}$$

where the function  $F(u)$  is defined by formula (13). The general solution of system (14), (15) for  $\lambda_2 = \lambda_3 = 0$  is

$$v_1 = [-2\lambda_1(t + c_1)]^{-\frac{1}{2}},$$

$$v_2 = -\frac{\mu_1}{\lambda_1} + \mu_2 t [-2\lambda_1(t + c_1)]^{-\frac{1}{2}} - \frac{\mu_3}{3\lambda_1} [-2\lambda_1(t + c_1)] + c_2 [-2\lambda_1(t + c_1)]^{-\frac{1}{2}},$$

where  $c_1$  and  $c_2$  are arbitrary constants. As a result, we have the following solution of Eq. (16):

$$\varphi(u) = [-2\lambda_1(t + c_1)]^{-\frac{1}{2}} x + \frac{\mu_1}{\lambda_1} - \mu_2 t [-2\lambda_1(t + c_1)]^{-\frac{1}{2}} + \frac{\mu_3}{3\lambda_1} [-2\lambda_1(t + c_1)] - c_2 [-2\lambda_1(t + c_1)]^{-\frac{1}{2}}. \tag{17}$$

Setting  $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = 0$  and  $c_2 = 0$  in (17), we obtain automodel solutions

$$\varphi(u) = [-2\lambda_1(t + c_1)]^{-\frac{1}{2}} \tag{18}$$

to the equation

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ F(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right], \quad (19)$$

where the function  $F(u)$  is defined by formula (13). Solutions of the form (18) are studied in [5].

b) Case  $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$ ,  $\lambda_3 \neq 0$ . The general solution of system (14), (15) is defined by the formulas

$$v_1 = c_1 \exp(\lambda_3 t),$$

$$v_2 = \frac{\mu_1 c_1}{\lambda_3} \exp(2\lambda_3 t) + \mu_2 c_1 t \exp(\lambda_3 t) - \frac{\mu_3}{\lambda_3} + c_2 \exp(\lambda_3 t).$$

Equation (1) in this case becomes

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ (\mu_1 u + A) \varphi' \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \mu_2 \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\varphi'} (\lambda_3 \varphi + \mu_3), \quad (20)$$

and has the following family of solutions:

$$\varphi(u) = c_1 x \exp(\lambda_3 t) - \frac{\mu_1 c_1^2}{\lambda_3} \exp(2\lambda_3 t) - \mu_2 c_1 t \exp(\lambda_3 t) + \frac{\mu_3}{\lambda_3} - c_2 \exp(\lambda_3 t). \quad (21)$$

When we set  $\mu_2 = 0$  in (21), we obtain a family of solutions

$$\varphi(u) = c_1 x \exp(\lambda_3 t) - \frac{\mu_1 c_1^2}{\lambda_3} \exp(2\lambda_3 t) + \frac{\mu_3}{\lambda_3} - c_3 \exp(\lambda_3 t).$$

to the equation

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ (\mu_1 u + A) \varphi' \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \frac{1}{\varphi'} (\lambda_3 \varphi + \mu_3), \quad (22)$$

c) Case  $\lambda_1 = 0$ ,  $\lambda_2 \neq 0$ ,  $\lambda_3 \neq 0$ . In this case, Eq. (1) has the form

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ (\mu_1 u + A) \varphi' \frac{\partial u}{\partial x} \right] + (\lambda_3 \varphi + \mu_2) \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\varphi'} (\lambda_3 \varphi + \mu_3), \quad (23)$$

and the general solution of system (14), (15) is defined as

$$v_1 = \frac{\lambda_3 c_1 \exp(\lambda_3 t)}{c_2 - \lambda_2 c_1 \exp(\lambda_3 t)},$$

$$v_2 = -\frac{\mu_1 \lambda_3 c_1}{\lambda_2} \frac{\exp(\lambda_3 t)}{c_2 - \lambda_2 c_1 \exp(\lambda_3 t)} \cdot \ln |c_2 - \lambda_2 c_1 \exp(\lambda_3 t)| +$$

$$+ (\mu_2 \lambda_3 - \mu_3 \lambda_2) c_1 t \frac{\exp(\lambda_3 t)}{c_2 - \lambda_2 c_1 \exp(\lambda_3 t)} -$$

$$- \frac{\mu_3 c_2}{\lambda_3 (c_2 - \lambda_2 c_1 \exp(\lambda_3 t))} + \frac{\lambda_3 c_3 \exp(\lambda_3 t)}{c_2 - \lambda_2 c_1 \exp(\lambda_3 t)}.$$

Substituting these expressions for  $v_1$  and  $v_2$  into  $\varphi(u) = v_1 x - v_2$ , we obtain solutions of Eq. (23).

**3. Exact solutions of Eq. (2).** In order to construct exact solutions of Eq. (2), we can use the substitution

$$p(x) = \omega_1(t)\varphi(u), \tag{24}$$

where  $p(x)$  is a solution of the equation

$$(p')^2 = Ap^2 + B, \quad A \neq 0, \quad B \neq 0.$$

Determine the functions  $\omega_1(t)$  and  $\varphi(u)$  from the condition that ansatz (24) reduces Eq. (2) to an ordinary differential equation with the unknown function  $\omega_1(t)$ . Then we obtain the following system of equations for determining the functions  $F(u)$ ,  $\varphi(u)$

$$-F \frac{\varphi''}{(\varphi')^3} + F' \frac{1}{(\varphi')^2} = \lambda_2 \frac{\varphi}{\varphi'}, \tag{25}$$

$$-FA \frac{\varphi^2 \varphi''}{(\varphi')^3} + F' A \frac{\varphi^2}{(\varphi')^2} + FA \frac{\varphi}{\varphi'} + H = \lambda_3 \frac{\varphi}{\varphi'}, \tag{26}$$

where  $\lambda_2, \lambda_3 \in \mathbb{R}$ . Suppose that  $F'(u) \neq 0$ . Then, integrating Eq. (25), which is linear with respect to the function  $F = F(u)$ , we have

$$F = (\lambda_2 \int \varphi du + c_1) \varphi', \tag{27}$$

where  $c_1$  is a constant. The function  $\omega_1(t)$  can be determined from the equation

$$\frac{\omega_1'}{\omega_1} + \lambda_2 B \frac{1}{\omega_1^2} + \lambda_3 = 0. \tag{28}$$

In the case  $\lambda_3 \neq 0$ , the solution of (28) is the function

$$\omega_1^2 = \frac{c_2}{\lambda_3} \exp(-2\lambda_3 t) - \frac{\lambda_2}{\lambda_3} B,$$

where  $c_2$  is a constant. In the case  $\lambda_3 = 0$ , the solution is

$$\omega_1^2 = -2\lambda_2 B t + c_2,$$

where  $c_2$  is a constant, and  $\lambda_2 \neq 0$ .

From Eqs. (25) and (26), we have

$$H = \frac{1}{\varphi'} (-\lambda_2 A \varphi^3 - AF\varphi + \lambda_3 \varphi). \tag{29}$$

As a result, we formulate the next theorem.

**Theorem 2.** *If Eq. (2) admits ansatz (24) and if  $F'(u) \neq 0$ , then the functions  $F(u)$  and  $H(u)$  are defined by formulas (27) and (29), respectively, whereas the function  $\omega_1(t)$  is a solution of Eq. (28).*

The obtained solutions of Eq. (2) can be generalized by means of the substitutions

$$\varphi(u) = \omega_1(t) \operatorname{ch}[k(x + c_3)] + \omega_2(t) \operatorname{sh}[k(x + c_3)], \tag{30}$$

if  $A = k^2 > 0$ ,

and

$$\varphi(u) = \omega_1(t) \cos[k(x + c_3)] + \omega_2(t) \sin[k(x + c_3)],$$

if  $A = -k^2 < 0$ .

For example, consider substitution (30). If the functions  $F(u)$  and  $H(u)$  are defined by formulas (27) and (29), respectively, and  $A = k^2 > 0$ , then substitution (30) reduces Eq. (2) to the system

$$\omega_1' = (-\lambda_2 k^2 \omega_1^2 + \lambda_2 k^2 \omega_2^2) \omega_1 + \lambda_3 \omega_1, \quad (31)$$

$$\omega_2' = (-\lambda_2 k^2 \omega_1^2 + \lambda_2 k^2 \omega_2^2) \omega_2 + \lambda_3 \omega_2, \quad (32)$$

Let  $\omega_1 \neq 0$ . From Eqs. (31) and (32), we derive that  $\omega_2 = c\omega_1$ ,  $c$  is a constant. Equation (31) becomes

$$\omega_1' = \lambda_2 k^2 (c^2 - 1) \omega_1^3 + \lambda_3 \omega_1. \quad (33)$$

If  $\lambda_3 \neq 0$ , then the solution of Eq. (33) is

$$\omega_1^2 = \left[ \frac{c_2}{\lambda_3} \exp(-2\lambda_3 t) - \frac{\lambda_2}{\lambda_3} k^2 (c^2 - 1) \right]^{-1},$$

where  $c_2 \neq 0$  is a constant.

The solution of Eq. (2) is

$$\varphi(u) = \left[ \frac{c_2}{\lambda_3} \exp(-2\lambda_3 t) - \frac{\lambda_2}{\lambda_3} k^2 (c^2 - 1) \right]^{-\frac{1}{2}} [\operatorname{ch}[k(x + c_3)] + c \cdot \operatorname{sh}[k(x + c_3)]].$$

If  $\lambda_3 = 0$ , then the solution of Eq. (33) is

$$\omega_1^2 = [-2\lambda_2 k^2 (c^2 - 1)t + c_2]^{-1},$$

where  $c_2$  is a constant and  $\lambda_2 \neq 0$ .

As a result, we have the following solution of Eq. (2):

$$\varphi(u) = [-2\lambda_2 k^2 (c^2 - 1)t + c_2]^{-\frac{1}{2}} [\operatorname{ch}[k(x + c_3)] + c \cdot \operatorname{sh}[k(x + c_3)]].$$

The case  $\omega_1 = 0$  reduces to integrating the equation

$$\omega_2' = \lambda_2 k^2 \omega_2^3 + \lambda_3 \omega_2.$$

**4. Conclusion.** We have described equations of the form (1) that admit ansatz (4). The functions  $F(u)$ ,  $G(u)$ , and  $H(u)$  in Eq. (1) can be represented in terms of  $\varphi(u)$ , and the corresponding system for finding  $\omega_1(t)$  and  $\omega_2(t)$  can be integrated. A voluntary choice of the function  $\varphi(u)$  in ansatz (4) allows one to find solutions of Eq. (1), that should satisfy predefined conditions. All this is true also for Eq. (2), which is a special case of Eq. (1). Moreover, ansatz (24) gives essentially new solutions of Eq. (2).

The techniques of constructing the solutions of Eqs. (1) and (2) described in Sections 2 and 3 can also be efficiently applied for constructing the solutions of plenty more equations, for example, nonlinear wave equations [7].



## REFERENCES

1. Polyanin, A. D. & Zaitsev, V. F. (2004). Handbook of nonlinear partial differential equations. Boca Raton, FL: Chapman & Hall/CRC.
2. Galaktionov, V. A. & Svirshchevskii, S. R. (2007). Exact solutions and invariant subspaces of nonlinear partial differential equations in mechanics and physics. CRC Press. Chapman & Hall/CRC Applied Mathematics and Nonlinear Science Series. Boca Raton, FL: Chapman & Hall/CRC.
3. Dorodnitsyn, V. A. (1979). Group properties and invariant solutions of an equation of nonlinear heat transport with a source or a sink. Preprint. AS USSR, Institute of Applied Mathematics; No 57. Moscow (in Russian).
4. Dorodnitsyn, V. A. (1982). On invariant solutions of the equation of non-linear heat conduction with a source. U.S.S.R. Comput. Math. Math. Phys., 22, No. 6, pp. 115-122.
5. Philip, J. R. (1960). General method of exact solution of the concentration-dependent diffusion equation. Aust. J. Phys., 13, No. 1, pp. 13-20. doi: <https://doi.org/10.1071/PH600001>
6. Barannyk, A., Barannyk, T. & Yuryk, I. (2011). Separation of variables for nonlinear equations of hyperbolic and Korteweg–de Vries type. Rep. Math. Phys., 68, pp. 97-105.
7. Barannyk, A. F., Barannyk, T. A. & Yuryk, I. I. (2013). Generalized separation of variables for nonlinear equation. Rep. Math. Phys., 71, pp. 1-13.

Received 08.02.2019

*А.Ф. Баранник*<sup>1</sup>, *Т.А. Баранник*<sup>2</sup>, *І.І. Юрик*<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Інститут математики Поморського університету, Слупськ, Польща

<sup>2</sup> Полтавський національний педагогічний університет ім. В.Г. Короленка

<sup>3</sup> Національний університет харчових технологій, Київ

E-mail: [anatolij.barannyk@apsl.edu.pl](mailto:anatolij.barannyk@apsl.edu.pl), [barannykt@rambler.ru](mailto:barannykt@rambler.ru), [i.yu@ukr.net](mailto:i.yu@ukr.net)

## ПРО ТОЧНІ РОЗВ'ЯЗКИ НЕЛІНІЙНОГО РІВНЯННЯ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ

Запропоновано метод побудови точних розв'язків нелінійного рівняння теплопровідності  $u_t = (F(u)u_x)_x + G(u)u_x + H(u)$ , який ґрунтується на використанні підстановки  $p(x) = \omega_1(t) \varphi(u) + \omega_2(t)$ , де функція  $p(x)$  є розв'язком рівняння  $(p')^2 = Ap^2 + B$ , а функції  $\omega_1(t)$ ,  $\omega_2(t)$  та  $\varphi(u)$  знаходяться з умови, що дана підстановка редукує рівняння до системи двох звичайних диференціальних рівнянь з невідомими функціями  $\omega_1(t)$  та  $\omega_2(t)$ .

**Ключові слова:** теоретико-групові методи, точні розв'язки, нелінійне рівняння теплопровідності, узагальнене розділення змінних.

*А.Ф. Баранник*<sup>1</sup>, *Т.А. Баранник*<sup>2</sup>, *И.И. Юрик*<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Институт математики Поморского университета, Слупск, Польша

<sup>2</sup> Полтавский национальный педагогический университет им. В.Г. Короленко

<sup>3</sup> Национальный университет пищевых технологий, Киев

E-mail: [anatolij.barannyk@apsl.edu.pl](mailto:anatolij.barannyk@apsl.edu.pl), [barannykt@rambler.ru](mailto:barannykt@rambler.ru), [i.yu@ukr.net](mailto:i.yu@ukr.net)

## О ТОЧНЫХ РЕШЕНИЯХ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВЕДНОСТИ

Предложен метод построения точных решений нелинейного уравнения теплопроводности  $u_t = (F(u)u_x)_x + G(u)u_x + H(u)$ , основанный на использовании подстановки  $p(x) = \omega_1(t) \varphi(u) + \omega_2(t)$ , где функция  $p(x)$  является решением уравнения  $(p')^2 = Ap^2 + B$ , а функции  $\omega_1(t)$ ,  $\omega_2(t)$  и  $\varphi(u)$  находятся из условия, что данная подстановка редуцирует уравнение к системе двух обыкновенных дифференциальных уравнений с неизвестными функциями  $\omega_1(t)$  и  $\omega_2(t)$ .

**Ключевые слова:** теоретико-групповые методы, точные решения, нелинейное уравнение теплопроводности, обобщенное разделение переменных.

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.05.018>

УДК 517.988

**Я.И. Ведель, С.В. Денисов, В.В. Семёнов**

Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко

E-mail: yana.vedel@gmail.com, sireukr@gmail.com, semenov.volodya@gmail.com

## **Сходимость брэгмановского экстраградиентного метода**

*Представлено членом-корреспондентом НАН Украины С.И. Ляшко*

*Доказана сходимость нового варианта экстраградиентного метода для приближенного решения вариационных неравенств с псевдомонотонными и липшицевыми операторами. В методе используется дивергенция Брэгмана вместо евклидова расстояния и новая регулировка величины шага, не требующая знания константы Липшица оператора. В отличие от применявшихся ранее правил выбора величины шага в предлагаемом методе не производится дополнительных вычислений значений оператора и прокс-отображения.*

**Ключевые слова:** *вариационное неравенство, экстраградиентный метод, дивергенция Брэгмана, сходимость.*

Многие задачи исследования операций и математической физики могут быть записаны в форме вариационных неравенств. Особенно популярны вариационные неравенства в математической экономике, математическом моделировании транспортных потоков и теории игр. Заметим, что с появлением генерирующих состязательных нейронных сетей (generative adversarial network (GAN)) интерес к алгоритмам решения вариационных неравенств возник и в среде специалистов в области машинного обучения.

Наиболее известным обобщением метода проекции градиента для вариационных неравенств является экстраградиентный метод Г.М. Корпелевич [1]. Исследованию этого алгоритма посвящено большое количество публикаций. В частности, предлагались модификации алгоритма Корпелевич с одним метрическим проектированием на допустимое множество [2–6]. Одним из современных вариантов экстраградиентного метода является проксимальный зеркальный метод А.С. Немировского [7]. Также интересный метод двойственной экстраполяции предложил Ю.Е. Нестеров [8]. А недавно [9, 10] исследованы двухэтапные проксимальные зеркальные методы – модификации двухэтапного проксимального алгоритма [11] с использованием дивергенции Брэгмана вместо евклидова расстояния.

В данном сообщении рассматривается брэгмановский экстраградиентный метод [7] с новой регулировкой шага, не требующей знания константы Липшица оператора. В отличие от применявшихся ранее правил выбора величины шага [5, 6, 12] в предлагаемом методе не

производятся дополнительных вычислений значений оператора и прокс-отображения. Для вариационных неравенств с псевдомонотонными и липшицевыми операторами, действующими в конечномерном линейном нормированном пространстве, доказана теорема сходимости метода.

**Постановка задачи и описание алгоритма.** Пусть  $E$  — конечномерное действительное линейное пространство. Это пространство снабдим нормой  $\|\cdot\|$ . Двойственное пространство обозначим  $E^*$ . Для  $a \in E^*$  и  $b \in E$  будем обозначать через  $(a, b)$  значение линейной функции  $a$  в точке  $b$ . Двойственная норма  $\|\cdot\|_*$  на  $E^*$  определена стандартным способом:  $\|a\|_* = \max\{(a, b) : \|b\| = 1\}$ .

Пусть  $C$  — непустое подмножество пространства  $E$ ,  $A$  — оператор, действующий из  $E$  в  $E^*$ . Рассмотрим вариационное неравенство:

$$\text{найти } x \in C : (Ax, y - x) \geq 0 \quad \forall y \in C, \quad (1)$$

множество решений которого обозначим  $S$ .

Предположим, что выполнены следующие условия:

множество  $C \subseteq E$  — выпуклое и замкнутое;

оператор  $A : E \rightarrow E^*$  — псевдомонотонный и липшицевый с константой  $L > 0$  на  $C$ ;

множество  $S$  не пусто.

Введем необходимые для формулировки алгоритма конструкции. Пусть функция  $\varphi : E \rightarrow \mathbb{R} = \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$  удовлетворяет условиям:

$\text{int dom } \varphi \subseteq E$  непустое выпуклое множество;

$\varphi$  непрерывно дифференцируема на  $\text{int dom } \varphi$ ;

если  $\text{int dom } \varphi \ni x_n \rightarrow x \in \text{bd dom } \varphi$ , то  $\|\nabla \varphi(x_n)\|_* \rightarrow +\infty$ ;

$\varphi$  сильно выпукла относительно нормы  $\|\cdot\|$  с константой сильной выпуклости  $\sigma > 0$ :

$$\varphi(a) \geq \varphi(b) - (\nabla \varphi(b), a - b) + \frac{\sigma}{2} \|a - b\|^2 \quad \forall a \in \text{dom } \varphi, b \in \text{int dom } \varphi.$$

Соответствующая функции  $\varphi$  дивергенция Брэгмана задается формулой [13]

$$V(a, b) = \varphi(a) - \varphi(b) - (\nabla \varphi(b), a - b) \quad \forall a \in \text{dom } \varphi, b \in \text{int dom } \varphi.$$

*Замечание 1.* Примеры практически важных дивергенций Брэгмана приведены в [13].

Имеет место полезное 3-точечное тождество [13]:

$$V(a, c) = V(a, b) + V(b, c) + (\nabla \varphi(b) - \nabla \varphi(c), a - b). \quad (2)$$

Из сильной выпуклости функции  $\varphi$  следует оценка

$$V(a, b) \geq \frac{\sigma}{2} \|a - b\|^2 \quad \forall a \in \text{dom } \varphi, b \in \text{int dom } \varphi. \quad (3)$$

Пусть  $K \subseteq \text{dom } \varphi$  — непустое замкнутое выпуклое множество, причем  $K \cap \text{int dom } \varphi = \emptyset$ . Рассмотрим сильно выпуклые задачи минимизации вида

$$P_x^K(a) = \arg \min_{y \in K} \{-(a, y - x) + V(y, x)\} \quad \forall a \in E^*, x \in \text{int dom } \varphi. \quad (4)$$

Известно [13], что задача (4) имеет единственное решение  $z \in K \cap \text{int dom } \varphi$ , причем

$$-(a, y - z) + (\nabla \varphi(z) - \nabla \varphi(x), y - z) \geq 0 \quad \forall y \in K. \quad (5)$$

Отображение  $P_x^K : E^* \rightarrow K \cap \text{int dom } \varphi$  называют прокс-отображением.

Опишем предлагаемый алгоритм решения вариационного неравенства (1).

**Алгоритм 1.** Выбираем элемент  $x_1 \in \text{int dom } \varphi$ ,  $\tau \in (0, \sigma)$  и положительное число  $\lambda_1$ . Полагаем  $n = 1$ .

**Шаг 1.** Вычислить

$$y_n = P_{x_n}^C(-\lambda_n Ax_n).$$

**Шаг 2.** Если  $y_n = x_n$ , то СТОП, иначе вычислить

$$x_{n+1} = P_{x_n}^C(-\lambda_n Ay_n),$$

**Шаг 3.** Вычислить

$$\lambda_{n+1} = \begin{cases} \min \left\{ \lambda_n, \tau \sqrt{\frac{2}{\sigma}} \frac{\sqrt{V(y_n, x_n)}}{\|Ay_n - Ax_n\|_*} \right\}, & \text{если } Ax_n \neq Ay_n, \\ \lambda_n, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Положить  $n := n + 1$  и перейти на шаг 1.

*Замечание 2.* В отличие от правил выбора  $\lambda_n$  из работ [5, 6, 12] в алгоритме 1 не производится дополнительных вычислений значений оператора  $A$  и прокс-отображения  $P_{x_n}^C$ .

*Замечание 3.* Последовательность  $(\lambda_n)$  неубывающая и ограничена снизу числом  $\min \left\{ \lambda_1, \frac{\tau}{L} \right\}$ . Следовательно, существует  $\lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n > 0$ .

Если для некоторого  $n \in \mathbb{N}$  в алгоритме 1 имеем  $y_n = x_n$ , то  $x_n \in S$ . Действительно, тогда

$$y_n = P_{x_n}^C(-\lambda_n Ax_n).$$

Из неравенства (5) следует

$$(Ax_n, y - x_n) + \frac{(\nabla\varphi(x_n) - \nabla\varphi(x_n), y - x_n)}{\lambda_n} = (Ax_n, y - x_n) \geq 0 \quad \forall y \in C,$$

то есть  $x_n \in S$ .

Предположим, что для всех  $n \in \mathbb{N}$  условие остановки на шаге 2 не выполняется и перейдем к обоснованию сходимости алгоритма 1.

**Сходимость алгоритма.** Докажем важную оценку, связывающую дивергенцию Брэгмана между порожденными алгоритмом 1 точками и произвольным элементом множества решений  $S$ .

**Лемма 1.** Для последовательностей  $(x_n)$ ,  $(y_n)$ , порожденных алгоритмом 1, имеет место неравенство

$$V(z, x_{n+1}) \leq V(z, x_n) - \left(1 - \frac{\mu_n}{\sigma}\right) V(y_n, x_n) - \left(1 - \frac{\mu_n}{\sigma}\right) V(x_{n+1}, y_n),$$

где  $z \in S$ ,  $\mu_n = \tau(\lambda_n/\lambda_{n+1})$ .

**Доказательство.** Пусть  $z \in S$ . Запишем 3-точечное тождество (2)

$$V(z, x_{n+1}) = V(z, x_n) - V(x_{n+1}, x_n) + (\nabla\varphi(x_{n+1}) - \nabla\varphi(x_n), x_{n+1} - z). \quad (6)$$

Из определения точек  $x_{n+1}$  и (5) следует

$$\lambda_n(Ay_n, z - x_{n+1}) + (\nabla\varphi(x_{n+1}) - \nabla\varphi(x_n), z - x_{n+1}) \geq 0. \quad (7)$$

Используя неравенство (7) для оценки скалярного произведения в (6), получаем

$$V(z, x_{n+1}) \leq V(z, x_n) - V(x_{n+1}, x_n) + \lambda_n(Ay_n, z - x_{n+1}). \quad (8)$$

Третье слагаемое в (8) представим в виде

$$V(x_{n+1}, x_n) = V(x_{n+1}, y_n) + V(y_n, x_n) + (\nabla\varphi(y_n) - \nabla\varphi(x_n), x_{n+1} - y_n).$$

Получаем

$$\begin{aligned} V(z, x_{n+1}) &\leq V(z, x_n) - V(x_{n+1}, y_n) - V(y_n, x_n) + \\ &+ (\nabla\varphi(x_n) - \lambda_n Ay_n - \nabla\varphi(y_n), x_{n+1} - y_n) + \lambda_n(Ay_n, z - y_n). \end{aligned}$$

Из псевдомонотонности оператора  $A$  следует  $(Ay_n, z - y_n) \leq 0$ . Таким образом,

$$\begin{aligned} V(z, x_{n+1}) &\leq V(z, x_n) - V(x_{n+1}, y_n) - V(y_n, x_n) + \\ &+ (\nabla\varphi(x_n) - \lambda_n Ay_n - \nabla\varphi(y_n), x_{n+1} - y_n). \end{aligned} \quad (9)$$

Поскольку  $x_{n+1} \in C$ , то

$$\begin{aligned} (\nabla\varphi(x_n) - \lambda_n Ay_n - \nabla\varphi(y_n), x_{n+1} - y_n) &= \underbrace{(\nabla\varphi(x_n) - \lambda_n Ax_n - \nabla\varphi(y_n), x_{n+1} - y_n)}_{\leq 0} + \\ &+ \lambda_n(Ax_n - Ay_n, x_{n+1} - y_n) \leq \lambda_n(Ax_n - Ay_n, x_{n+1} - y_n). \end{aligned} \quad (10)$$

Учитывая (10) в (9), получаем

$$V(z, x_{n+1}) \leq V(z, x_n) - V(x_{n+1}, y_n) - V(y_n, x_n) + \lambda_n(Ax_n - Ay_n, x_{n+1} - y_n). \quad (11)$$

Теперь оценим слагаемое  $\lambda_n(Ax_n - Ay_n, x_{n+1} - y_n)$  с помощью неравенства (3). Имеем

$$\begin{aligned} \lambda_n(Ax_n - Ay_n, x_{n+1} - y_n) &\leq \lambda_n \|Ax_n - Ay_n\|_* \|x_{n+1} - y_n\| \leq \\ &\leq \frac{2}{\sigma} \frac{\lambda_n}{\lambda_{n+1}} \tau \sqrt{V(y_n, x_n)} \sqrt{V(x_{n+1}, y_n)} \leq \frac{\mu_n}{\sigma} V(y_n, x_n) + \frac{\mu_n}{\sigma} V(x_{n+1}, y_n). \end{aligned} \quad (12)$$

Применив (12) в (11), получим

$$\begin{aligned} V(z, x_{n+1}) &\leq V(z, x_n) - V(x_{n+1}, y_n) - V(y_n, x_n) + \frac{\mu_n}{\sigma} V(y_n, x_n) + \frac{\mu_n}{\sigma} V(x_{n+1}, y_n) = \\ &= V(z, x_n) - \left(1 - \frac{\mu_n}{\sigma}\right) V(x_{n+1}, y_n) - \left(1 - \frac{\mu_n}{\sigma}\right) V(y_n, x_n), \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

Сформулируем основной результат работы.

**Теорема 1.** Пусть множество  $C \subseteq E$  – выпуклое и замкнутое, оператор  $A: E \rightarrow E^*$  – псевдомонотонный и липшицевый с константой  $L > 0$  и  $S \neq \emptyset$ . Тогда последовательности  $(x_n)$  и  $(y_n)$ , порожденные алгоритмом 1, сходятся к некоторой точке  $\bar{z} \in S$ .

*Замечание 4.* В дальнейшем мы рассмотрим рандомизированную версию алгоритма 1 и проведем анализ сходимости. Это поможет продвинуться в направлении использования метода для решения вариационных неравенств большого размера и для обучения генерирующих состязательных нейронных сетей (GAN).

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Корпелевич Г.М. Экстраградиентный метод для отыскания седловых точек и других задач. *Экономика и мат. методы*. 1976. **12**, № 4. С. 747–756.
2. Tseng P. A modified forward-backward splitting method for maximal monotone mappings. *SIAM J. Control Optim.* 2000. **38**. P. 431–446. doi: <https://doi.org/10.1137/S0363012998338806>
3. Semenov V.V. A strongly convergent splitting method for systems of operator inclusions with monotone operators. *J. Autom. Inform. Sci.* 2014. **46**, № 5. P. 45–56. doi: <https://doi.org/10.1615/JAutomatInfScien.v46.i5.40>
4. Semenov V.V. Hybrid splitting methods for the system of operator inclusions with monotone operators. *Cybern. Syst. Anal.* 2014. **50**. P. 741–749. doi: <https://doi.org/10.1007/s10559-014-9664-y>
5. Denisov S.V., Semenov V.V., Chabak L.M. Convergence of the modified extragradient method for variational inequalities with non-lipschitz operators. *Cybern. Syst. Anal.* 2015. **51**. P. 757–765. doi: <https://doi.org/10.1007/s10559-015-9768-z>
6. Verlan D.A., Semenov V.V., Chabak L.M. A strongly convergent modified extragradient method for variational inequalities with non-Lipschitz operators. *J. Autom. Inform. Sci.* 2015. **47**, № 7. P. 31–46. doi: <https://doi.org/10.1615/JAutomatInfScien.v47.i7.40>
7. Nemirovski A. Prox-method with rate of convergence  $O(1/t)$  for variational inequalities with Lipschitz continuous monotone operators and smooth convex-concave saddle point problems. *SIAM J. Optim.* 2004. **15**. P. 229–251. doi: <https://doi.org/10.1137/S1052623403425629>
8. Nesterov Yu. Dual extrapolation and its applications to solving variational inequalities and related problems. *Math. Program.* 2007. **109**. Iss. 2–3. P. 319–344. doi: <https://doi.org/10.1007/s10107-006-0034-z>
9. Semenov V.V. A Version of the mirror descent method to solve variational inequalities. *Cybern. Syst. Anal.* 2017. **53**. P. 234–243. doi: <https://doi.org/10.1007/s10559-017-9923-9>
10. Semenov V.V. Modified extragradient method with Bregman divergence for variational inequalities. *J. Autom. Inform. Sci.* 2018. **50**, Iss. 8. P. 26–37. doi: <https://doi.org/10.1615/JAutomatInfScien.v50.i8.30>
11. Lyashko S.I., Semenov V.V. A new two-step proximal algorithm of solving the problem of equilibrium programming. *Optimization and its applications in control and data sciences*: Goldengorin, B. (ed.). Cham: Springer, 2016. P. 315–325 (Springer Optimization and Its Applications; Vol. 115). doi: [https://doi.org/10.1007/978-3-319-42056-1\\_10](https://doi.org/10.1007/978-3-319-42056-1_10)
12. Khobotov E.N. Modification of the extra-gradient method for solving variational inequalities and certain optimization problems. *USSR Comput. Math. Math. Phys.* 1987. **27**, Iss. 5. P. 120–127. doi: [https://doi.org/10.1016/0041-5553\(87\)90058-9](https://doi.org/10.1016/0041-5553(87)90058-9)
13. Beck A. First-order methods in optimization. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2017. P. 494. doi: <https://doi.org/10.1137/1.9781611974997>

Поступило в редакцию 04.03.2019

REFERENCES

1. Korpelevich, G. M. (1976). The extragradient method for finding saddle points and other problems. *Ekonomika i Matematicheskie Metody*, 12, No. 4, pp. 747-756 (in Russian).
2. Tseng, P. (2000). A modified forward-backward splitting method for maximal monotone mappings. *SIAM J. Control Optim.*, 38, pp. 431-446. doi: <https://doi.org/10.1137/S0363012998338806>
3. Semenov, V. V. (2014). A strongly convergent splitting method for systems of operator inclusions with monotone operators. *J. Autom. Inform. Sci.*, 46, No. 5, pp. 45-56. doi: <https://doi.org/10.1615/JAutomatInfScien.v46.i5.40>
4. Semenov, V. V. (2014). Hybrid splitting methods for the system of operator inclusions with monotone operators. *Cybern. Syst. Anal.*, 50, pp. 741-749. doi: <https://doi.org/10.1007/s10559-014-9664-y>
5. Denisov, S. V., Semenov, V. V. & Chabak, L. M. (2015). Convergence of the modified extragradient method for variational inequalities with non-Lipschitz operators. *Cybern. Syst. Anal.*, 51, pp. 757-765. doi: <https://doi.org/10.1007/s10559-015-9768-z>
6. Verlan, D. A., Semenov, V. V. & Chabak, L. M. (2015). A strongly convergent modified extragradient method for variational inequalities with non-Lipschitz operators. *J. Autom. Inform. Sci.*, 47, No. 7, pp. 31-46. doi: <https://doi.org/10.1615/JAutomatInfScien.v47.i7.40>

7. Nemirovski, A. (2004). Prox-method with rate of convergence  $O(1/t)$  for variational inequalities with Lipschitz continuous monotone operators and smooth convex-concave saddle point problems. *SIAM J. Optim.*, 15, pp. 229-251. doi: <https://doi.org/10.1137/S1052623403425629>
8. Nesterov, Yu. (2007). Dual extrapolation and its applications to solving variational inequalities and related problems. *Math. Program.*, 109, Iss. 2-3, pp. 319–344. doi: <https://doi.org/10.1007/s10107-006-0034-z>
9. Semenov, V. V. (2017). A version of the mirror descent method to solve variational inequalities. *Cybern. Syst. Anal.*, 53, pp. 234-243. doi: <https://doi.org/10.1007/s10559-017-9923-9>
10. Semenov, V. V. (2018). Modified extragradient method with bregman divergence for variational inequalities. *J. Autom. Inform. Sci.*, 50, Iss. 8, pp. 26-37. doi: <https://doi.org/10.1615/JAutomatInfScien.v50.i8.30>
11. Lyashko, S. I. & Semenov, V. V. (2016). A new two-step proximal algorithm of solving the problem of equilibrium programming. In Goldengorin, B. (Ed.). *Optimization and its applications in control and data sciences* (pp. 315-325). *Optimization and Its Applications*, Vol. 115. Cham: Springer. doi: [https://doi.org/10.1007/978-3-319-42056-1\\_10](https://doi.org/10.1007/978-3-319-42056-1_10)
12. Khobotov, E. N. (1987). Modification of the extra-gradient method for solving variational inequalities and certain optimization problems. *USSR Comput. Math. Math. Phys.*, 27, Iss. 5, pp. 120-127. doi: [https://doi.org/10.1016/0041-5553\(87\)90058-9](https://doi.org/10.1016/0041-5553(87)90058-9)
13. Beck, A. (2017). *First-order methods in optimization*. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics. doi: <https://doi.org/10.1137/1.9781611974997>

Received 04.03.2019

Я.І. Ведель, С.В. Денисов, В.В. Семенов

Київський національний університет ім. Тараса Шевченка

E-mail: yana.vedel@gmail.com, sireukr@gmail.com, semenov.volodya@gmail.com

#### ЗБІЖНІСТЬ БРЕГМАНІВСЬКОГО ЕКСТРАГРАДІЄНТНОГО МЕТОДУ

Доведено збіжність нового варіанта екстраградиентного методу для наближеного розв'язання варіаційних нерівностей з псевдомонотонними та ліпшицевими операторами. У методі використовується дивергенція Брегмана замість евклідової відстані та нове регулювання величини кроку, що не вимагає знання константи Ліпшиця оператора. На відміну від правил вибору величини кроку, що застосовувалися раніше, в пропонуваному методі не проводиться додаткових обчислень значень оператора та прокс-відображення.

**Ключові слова:** *варіаційна нерівність, екстраградиентний метод, дивергенція Брегмана, збіжність.*

Ya.I. Vedel, S.V. Denisov, V.V. Semenov

Taras Shevchenko National University of Kiev

E-mail: yana.vedel@gmail.com, sireukr@gmail.com, semenov.volodya@gmail.com

#### CONVERGENCE OF THE BREGMAN EXTRAGRADIENT METHOD

The convergence of a new extragradient-type method for the approximate solution of variational inequalities with pseudomonotonic and Lipschitz-continuous operators acting in a finite-dimensional linear normed space is proved. The method uses the Bregman divergence instead of the Euclidean distance and the new adjustment of the step size, which does not require knowledge of the Lipschitz constant of an operator. In contrast to the previously used rules for choosing the step size, the proposed method does not perform additional calculations for the operator values and prox-map.

**Keywords:** *variational inequality, extragradient method, Bregman divergence, convergence.*



doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.05.024>

УДК 539.3

**Я.Я. Рушицький**, член-кореспондент НАН України

Інститут механіки НАН України ім. С.П. Тимошенка, Київ

E-mail: rushch@inmech.kiev.ua

## Про поверхневу хвилю вздовж циліндричної порожнини в неоднорідному пружному середовищі

*Класична задача Біо про поверхневу гармонічну пружну хвилю, що поширюється вздовж вільної поверхні циліндричної порожнини, узагальнена на випадок неоднорідності середовища поширення. Припущено, що густина і пружні параметри Ляме середовища змінюються зі збільшенням радіуса (зменшуються при відході від порожнини) за експоненціальним законом. Використано попередні результати про загальні представлення розв'язків. Задача розв'язана аналітично до того рівня, коли далі повинні бути використані числові методи.*

**Ключові слова:** циліндрична поверхнева пружна хвиля, експоненціально неоднорідне середовище, вільна циліндрична поверхня, функції Макдональда, згасання гармонічної хвилі.

**1. Постановка задачі.** Розглянемо нескінченне тіло з циліндричною круговою порожниною, яка має вісь симетрії  $Oz$  і радіус  $r_0$ . Припустимо, що це тіло відповідає моделі трансверсально ізотропного неоднорідного пружного середовища з властивостями, які змінюються експоненціально по радіусу з відходом від граничної поверхні. Нехай вздовж поверхні порожнини поширюється в напрямку осі  $Oz$  гармонічна хвиля, яка затухає в радіальному напрямку. Така задача може розглядатися як узагальнення класичної задачі Біо [1], розв'язаної в припущенні ізотропії та однорідності середовища і осової симетрії пружного стану.

**2. Основні етапи розв'язування класичної задачі Біо [1]. 2.1. Постановка задачі і основні рівняння в потенціалах.** Вибирається циліндрична система координат  $Or\vartheta z$  і розглядається гармонічна хвиля з фазовою змінною  $\sigma = k(z - vt)$ , невідомим хвильовим числом  $k = (\omega/v)$ , невідомою фазовою швидкістю  $v$  і довільними частотою  $\omega$  і амплітудою  $A$ . Припускається, що хвиля поширюється в нескінченному середовищі з циліндричною порожниною постійного радіуса  $r_0$  у напрямку вертикальної координати  $z$  і можливо загасає в напрямку радіальної координати  $r$ . У цій лінійній постановці і у припущенні, що деформування пружне задача осесиметрична і деформації описуються лише двома зміщеннями  $(u_r(r, z, t), u_\varphi(r, z, t) = 0, u_z(r, z, t))$  та двома рівняннями Ляме такого вигляду:

$$(1/2)(C_{11} - C_{12})[\Delta_{rz}u_r - (1/r^2)u_r] + (1/2)(C_{11} + C_{12})(u_{r,r} + (1/r)u_r + u_{z,z})_{,r} = \rho u_{r,tt}, \quad (1)$$

© Я.Я. Рушицький, 2019



$$(1/2)(C_{11}-C_{12})\Delta_{rz}u_z+(1/2)(C_{11}+C_{12})[u_{r,r}+(1/r)u_r+u_{z,z}]_z=\rho u_{z,tt}, \quad (2)$$

чи

$$(\lambda+2\mu)[u_{r,rr}+(1/r)u_{r,r}-(1/r^2)u_r+u_{z,rz}]+\mu(u_{r,zz}-u_{z,rz})=\rho u_{r,tt}, \quad (3)$$

$$(\lambda+2\mu)[u_{r,rz}+(1/r)u_{r,z}+u_{z,zz}]-\mu[(1/r)(u_{r,z}-u_{z,r})+(u_{r,rz}-u_{z,rr})]=\rho u_{z,tt}. \quad (4)$$

Далі вводяться потенціали  $\Phi(r, z, t)$ ,  $\Psi(r, z, t)$

$$u_r=\Phi_{,r}-\Psi_{,z}, \quad u_z=\Phi_{,z}+\Psi_{,r}+(1/r)\Psi, \quad (5)$$

при підстановці яких у рівняння (3) та (4) отримуються два незв'язані лінійних хвильових рівняння

$$\Delta_{rz}\Phi-(1/v_L)^2\Phi_{,tt}=0, \quad (6)$$

$$\Delta_{rz}\Psi-(1/r^2)\Psi-(1/v_L)^2\Psi_{,tt}=0, \quad (7)$$

де використані стандартні позначення оператора Лапласа

$$\Delta_{rz}=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

і швидкостей поздовжньої та поперечної хвиль  $v_L=\sqrt{(\lambda+2\mu)/\rho}$ ,  $v_T=\sqrt{\mu/\rho}$  в ізотропному пружному матеріалі.

2.2. Розв'язок хвильових рівнянь у вигляді функцій Макдональда. Розв'язок рівнянь (6) та (7) шукається у вигляді гармонічних хвиль у напрямку вертикальної координати

$$\Phi(r, z, t)=\Phi^*(r)e^{i(kz-\omega t)}, \quad \Psi(r, z, t)=\Psi^*(r)e^{i(kz-\omega t)}. \quad (8)$$

Підстановка розв'язків (8) у хвильові рівняння (6) та (7) дає рівняння щодо невідомих амплітуд  $\Phi^*(r)$ ,  $\Psi^*(r)$

$$\Phi^*_{,rr}+(1/r)\Phi^*_{,r}-(k^2-k_L^2)\Phi^*=0 \quad (\Phi^*_{,rr}+(1/r)\Phi^*_{,r}-k^2(1-(v/v_L)^2)\Phi^*=0), \quad (9)$$

$$\Psi^*_{,rr}-(1/r)\Psi^*_{,r}-[k^2-k_T^2+(1/r^2)]\Psi^*=0, \quad (10)$$

$$(\Psi^*_{,rr}-(1/r)\Psi^*_{,r}-\{k^2[1-(v/v_T)^2]+(1/r^2)\})\Psi^*=0.$$

Отримані рівняння відповідають рівнянню Бесселя для функцій Макдональда  $K_\lambda(x)$  (модифікованим функціям Бесселя другого роду) [2]

$$y''+(1/x)y'-[1+(\lambda^2/x^2)]y=0. \quad (11)$$

Більш точно рівняння (9), (10) мають розв'язок у вигляді функцій Макдональда, якщо виконуються умови

$$k^2-k_L^2>0, \quad k^2-k_T^2>0 \quad (k^2(1-(v/v_L)^2)>0, \quad k^2(1-(v/v_T)^2)>0). \quad (12)$$

Згідно з умовами (12), хвильове число циліндричної хвилі повинно бути дійсним і її швидкість меншою від швидкостей класичних поздовжньої і поперечної плоских хвиль.

Далі хвильові рівняння (9) та (10) розглядаються кожне окремо.

Перше записується таким чином:

$$\Phi^*_{,rr} + (1/r)\Phi^*_{,r} - m_L^2\Phi^* = 0, \quad m_L = k\sqrt{(1-(v/v_L)^2)}. \quad (13)$$

Це рівняння має розв'язок у вигляді функції Макдональда

$$\Phi^*(r) = A_\Phi K_0(m_L r) \quad (14)$$

нульового порядку і невідомого аргументу  $x = m_L r$ , який включає невідому швидкість хвилі. Амплітудний коефіцієнт  $A_\Phi$  вважається постійним і довільним.

Друге хвильове рівняння може бути записане у вигляді

$$\Psi^*_{,rr} - (1/r)\Psi^*_{,r} - \{m_T^2 + (1/r^2)\}\Psi^* = 0, \quad m_T = k\sqrt{(1-(v/v_T)^2)}. \quad (15)$$

Відповідний розв'язок цього рівняння за умов (12)

$$\Psi^*(r) = A_\Psi K_0(m_T r) \quad (16)$$

виражається через функцію Макдональда

$$K_1 = \left( r\sqrt{(k^2 - k_T^2)} \right)$$

першого порядку і невідомого аргументу  $x = m_T r$ , який включає невідому швидкість хвилі. Амплітудний коефіцієнт  $A_\Psi$  вважається постійним і довільним.

Зазначимо, що функції Макдональда мають властивість зменшення значень (загасання) зі збільшенням їх аргументу. Тому хвилі (15), (16), які поширюються вздовж вертикальної координати  $z$ , можуть розглядатися як хвилі з амплітудами  $\Phi^*(r)$ ,  $\Psi^*(r)$ , що загасають при збільшенні радіальної координати  $r$ . Це означає, що амплітуди можуть зменшуватися істотно при збільшенні відстані від поверхні циліндричної порожнини. У цьому сенсі хвилі (15) та (16) є поверхневими. Також у цьому полягає сенс умов (12).

Такі ж умови використані в аналізі класичної поверхневої хвилі Релея, яка поширюється вздовж плоскої поверхні пружного ізотропного тіла. Однак хвиля Релея загасає як експоненціальна функція при відході від вільної поверхні, тоді як циліндрична хвиля Біо загасає як функції Макдональда. При цьому аргументи в експоненціальній функції і функціях Макдональда ідентичні і залежать від швидкості хвилі.

*2.3. Граничні умови. Рівняння для невідомого хвильового числа.* Граничні умови відповідають відсутності напружень на поверхні  $r = r_0$

$$\sigma_{rr}(r = r_0, t) = 0, \quad \sigma_{rz}(r = r_0, t) = 0. \quad (17)$$

Напруження

$$\sigma_{rr} = 2\mu u_{r,r} + \lambda((u_r/r) + u_{r,r} + u_{z,z}), \quad \sigma_{rz} = \mu(u_{r,z} + u_{z,r}) \quad (18)$$

записуються через потенціали

$$\sigma_{rr} = (\lambda + 2\mu)(\Phi_{,rr} - \Psi_{,rz}) + \lambda\{(1/r)(\Phi_{,r} - \Psi_{,z}) + \Phi_{,zz} + \Psi_{,rz} + (1/r)\Psi_{,z}\}, \quad (19)$$

$$\sigma_{rz} = \mu[(\Phi_{,rz} - \Psi_{,zz}) + \Phi_{,zr} + \Psi_{,rr} + (1/r)\Psi_{,r} - (1/r^2)\Psi]. \quad (20)$$

Тоді граничні умови (17) можна записати у вигляді

$$[2\mu(\Phi_{,rr} - \Psi_{,rz}) + \lambda\Delta\Phi]_{r=r_0} = 0, \quad [2(\Phi_{,rz} - \Psi_{,zz}) + \Delta\Psi - (1/r^2)\Psi]_{r=r_0} = 0. \quad (21)$$

У роботі [1] Біо використав вирази

$$\Delta\Phi - (1/v_L)^2\Phi_{,tt} = 0, \quad \Delta\Psi - (1/r^2)\Psi - (1/v_T)^2\Psi_{,tt} = 0$$

і переписав рівняння (21) таким чином

$$[(\Phi_{,rr} - \Psi_{,rz}) + (\lambda/2\mu)(1/v_L)^2\Phi_{,tt}]_{r=r_0} = 0, \quad [2(\Phi_{,rz} - \Psi_{,zz}) + (1/v_T)^2\Psi_{,tt}]_{r=r_0} = 0.$$

Тоді підстановка розв'язків (14), (16) у граничні умови (21) дає два однорідних алгебраїчних рівняння щодо невідомих постійних амплітудних коефіцієнтів

$$\left(1 - (v/v_L)^2 - \frac{\lambda}{\mu}(v/v_L)^2 \frac{K_0(m_L r_0)}{K_0(m_L r_0) + K_2(m_L r_0)}\right) A_\Phi - \sqrt{1 - (v/v_L)^2} A_\Psi = 0, \quad (22)$$

$$2\sqrt{1 - (v/v_L)^2} A_\Phi + (2 - (v/v_T)^2) \frac{K_1(m_T r_0)}{K_1(m_L r_0)} A_\Psi = 0. \quad (23)$$

Аналіз цих рівнянь, що описують циліндричну поверхневу хвилю, подібний до аналізу, проведеного Релеєм для класичної хвилі, яка поширюється вздовж площини [3–6]. Певною новацією в аналізі системи (22), (23) є розгляд системи щодо величин  $K_1(m_L r_0)A_\Phi$  і  $K_1(m_S r_0)A_\Psi$

$$\left\{ (1 - (v/v_L)^2) \left[ \frac{K_0(m_L r_0)}{K_1(m_L r_0)} + \frac{1}{m_L r_0} \right] - \frac{\lambda}{2\mu} (v/v_L)^2 \frac{K_0(m_L r_0)}{K_1(m_L r_0)} \right\} K_1(m_L r_0) A_\Phi +$$

$$+ \sqrt{1 - (v/v_S)^2} \left[ \frac{K_0(m_T r_0)}{K_1(m_T r_0)} + \frac{1}{m_T r_0} \right] K_1(m_T r_0) A_\Psi = 0, \quad (24)$$

$$2\sqrt{1 - (v/v_L)^2} K_1(m_L r_0) A_\Phi + (2 - (v/v_T)^2) K_1(m_T r_0) A_\Psi = 0. \quad (25)$$

Розв'язування системи (24), (25) дає два результати. По-перше, розв'язок знаходиться з точністю до одного амплітудного множника. По-друге, рівняння для визначення фазової швидкості циліндричної поверхневої хвилі може бути отримане в явному вигляді.

В роботі [1] Біо продемонстрував певне мистецтво в оперуванні з функціями Макдональда і записав рівняння (24) лише через функції нульового і першого порядків. Для цього були використані відомі формули [2]

$$K_0'(x) = -K_1(x), \quad K_1'(x) = -K_0''(x),$$

$$K_0''(x) + (1/x)K_0'(x) = K_0(x), \quad K_0''(x) = (1/x)K_1(x) + K_0(x). \quad (26)$$

В результаті рівняння для визначення фазової швидкості циліндричної хвилі має вигляд

$$(2 - (v/v_T)^2) \left\{ [2 - (v/v_T)^2] \frac{K_0(m_L r_0)}{K_1(m_L r_0)} + \frac{(1 - (v/v_L)^2)}{m_L r_0} \right\} -$$

$$- 4\sqrt{1 - (v/v_L)^2} \sqrt{1 - (v/v_T)^2} \left[ \frac{K_0(m_T r_0)}{K_1(m_T r_0)} + \frac{1}{m_T r_0} \right] = 0. \quad (27)$$

Запишемо для порівняння відповідне рівняння для хвилі Релея [3–6]

$$-4\sqrt{1-(v/v_L)^2}\sqrt{1-(v/v_S)^2}[2-(v/v_S)^2]^2=0. \quad (28)$$

Таким чином, присутність функцій Макдональда в рівнянні (27) істотно ускладнює аналіз цього рівняння, оскільки функції згідно зі співвідношеннями

$$m_L = k\sqrt{1-(v/v_L)^2}, \quad m_S = k\sqrt{1-(v/v_T)^2}$$

мають в аргументі невідому швидкість. Коли радіус порожнини великий, тоді функції Макдональда можуть бути представлені простою формулою

$$K_0(r) = K_1(r) = e^{-r}\sqrt{\pi/2r}$$

і рівняння (27) зводиться до рівняння Релея (28).

Строго кажучи, аналітична частина аналізу закінчується отриманням рівняння (27). Далі аналіз можна продовжити за допомогою числових методів і Біо в [1] пропонує деякі коментарі і висновки, основані на числових можливостях 1950-х років.

Можливості аналітичного підходу ще зберігаються в задачі про існування прийнятної швидкості хвилі. Перш за все, рівняння (27) залежить від пружних постійних і ця залежність може бути представлена в формі залежності від відношення відомих швидкостей  $(v_L/v_T)$ . Якщо прийняти позначення  $(v^2/v_T^2) = z$ , то рівняння (27) можна записати у вигляді

$$(2-z(v_L/v_T)^2)\left\{(2-z)\frac{K_0(r_0k\sqrt{1-z(v_L/v_T)^2})}{K_1(r_0k\sqrt{1-z(v_L/v_T)^2})} + \frac{(1-z(v_L/v_T)^2)}{r_0k\sqrt{1-z(v_L/v_T)^2}}\right\} - 4\sqrt{(1-z)^2}\sqrt{1-z(v_L/v_T)^2}\left[\frac{K_0(r_0k\sqrt{1-z})}{K_1(r_0k\sqrt{1-z})} + \frac{1}{r_0k\sqrt{1-z}}\right] = 0. \quad (29)$$

**3. Циліндрична хвиля, що поширюється вздовж поверхні циліндричної порожнини у напрямку вертикальної осі (осесиметрична задача ізотропної неоднорідної теорії пружності).** Розглянемо нескінчене ізотропне пружне тіло з циліндричною круговою порожниною, яка має вісь симетрії  $Oz$  і радіус  $r_0$ . Припустимо, що пружні модулі Ляме і густина є функціями і експоненціально залежать від радіуса за достатньо простим законом

$$\lambda(r) = \lambda_0 e^{-\alpha r}; \quad \mu(r) = \mu_0 e^{-\alpha r}; \quad \rho(r) = \rho_0 e^{-\alpha r} \left( \alpha > 0, \lambda_0, \mu_0 = \text{const}; \quad v_o = \frac{\lambda_0}{2(\lambda_0 + \mu_0)} \right). \quad (30)$$

Якщо вздовж поверхні порожнини поширюється гармонічна хвиля у напрямку осі  $Oz$ , амплітуда якої загасає при відході від порожнини, то така задача може розглядатися як узагальнення на випадок неоднорідності матеріалу задачі Біо [1], яку Біо розв'язав у припущенні ізотропії матеріалу.

Перша принципова відмінність сформульованої задачі від задачі однорідної теорії виявляється у визначальних рівняннях

$$\sigma_{rr}(r, z, t) = e^{-\alpha r} \{(\lambda_0 + 2\mu_0)u_{r,r}(r, z, t) + \lambda_0(1/r)u_r(r, z, t) + \lambda_0 u_{z,z}(r, z, t)\}; \quad (31)$$

$$\sigma_{\theta\theta}(r, z, t) = e^{-\alpha r} \{\lambda_0 u_{r,r}(r, z, t) + \lambda_0 \bar{u}_r(r, z, t) + 2\mu_0(1/r)u_r(r, z, t) + \lambda_0 u_{z,z}(r, z, t)\}; \quad (32)$$

$$\sigma_{zz}(r, z, t) = e^{-\alpha r} \{ \lambda_0 u_{r,r}(r, z, t) + \lambda_0 (1/r) u_r(r, z, t) + (\lambda_0 + 2\mu_0) u_{z,z}(r, z, t) \}; \quad (33)$$

$$\sigma_{rz}(r, z, t) = e^{-\alpha r} \mu_0 [u_{r,z}(r, z, t) + u_{z,r}(r, z, t)]. \quad (34)$$

Залежності (31)–(34) ускладнюють процедуру переходу від рівнянь руху

$$\sigma_{rr,r} + \sigma_{rz,z} + (1/r)(\sigma_{rr} - \sigma_{\varphi\varphi}) = \rho_0 e^{-\alpha r} u_{r,tt}, \quad \sigma_{rz,r} + \sigma_{zz,z} + (1/r)\sigma_{rz} = \rho_0 e^{-\alpha r} u_{z,tt} \quad (35)$$

до системи рівнянь типу Ляме неоднорідної теорії пружності [7]. Така система, в якій вже враховані представлення (30) і прийнято припущення про гармонічність з частотою  $\omega$  руху з часом

$$u_{r(z)}(r, z, t) = \bar{u}_{r(z)}(r, z) e^{-i\omega t}, \quad (36)$$

теж містить два рівняння

$$(\lambda_0 + 2\mu_0)[\bar{u}_{r,rr} + (1/r)\bar{u}_{r,r} - ((1/r^2) - k_{0L}^2)\bar{u}_r + \bar{u}_{r,rz}] + \mu_0(\bar{u}_{r,zz} - \bar{u}_{z,rz}) - \quad (37)$$

$$-\alpha \{ (\lambda_0 + 2\mu_0)\bar{u}_{r,r} + \lambda_0(1/r)\bar{u}_r - \lambda_0\bar{u}_{z,z} \} = 0; \quad k_{0L} = \omega/v_{0L}, \quad v_{0L} = \sqrt{(\lambda_0 + 2\mu_0)/\rho_0};$$

$$(\lambda_0 + 2\mu_0)[\bar{u}_{r,rz} + (1/r)\bar{u}_{r,z} + \bar{u}_{z,zz}] - \mu_0[(1/r)(\bar{u}_{r,z} - \bar{u}_{z,r}) + (\bar{u}_{r,rz} - \bar{u}_{z,rr}) + k_{0T}^2\bar{u}_z] - \quad (38)$$

$$-\alpha\mu_0(\bar{u}_{r,z} + \bar{u}_{z,r}) = 0; \quad k_{0T} = \omega/v_{0T}, \quad v_{0T} = \sqrt{\mu_0/\rho_0}.$$

Далі будемо дотримуватися публікацій [8–10], у яких отримані загальні представлення зміщень для осесиметричної задачі статичної ізотропної неоднорідної теорії пружності для системи рівнянь, подібної до системи (37), (38). Введемо замість функцій  $\bar{u}_r(r, z)$ ,  $\bar{u}_z(r, z)$  дві нові функції  $R(r, z)$ ,  $Z(r, z)$

$$\bar{u}_r = (\partial R / \partial r), \quad \bar{u}_z = Z \quad (39)$$

і підставимо представлення (39) у рівняння (37) та (38). Отримаємо два нових рівняння щодо функцій  $R(r, z)$ ,  $Z(r, z)$ .

$$(\lambda_0 + 2\mu_0)[R_{,rrr} + (1/r)R_{,rr} - ((1/r^2) - k_{0L}^2)R_{,r}] + \mu_0 R_{,zz} - \quad (40)$$

$$-\alpha \{ (\lambda_0 + 2\mu_0)R_{,rr} + \lambda_0(1/r)R_{,r} \} + (\lambda_0 + \mu_0)Z_{,rz} + \alpha\lambda_0 Z_{,z} = 0;$$

$$(\lambda_0 + \mu_0)(\Delta_r R)_{,z} - \alpha\mu_0 R_{,z} + (\lambda_0 + 2\mu_0)Z_{,zz} - \mu_0 \Delta_r Z + \mu_0 k_{0T}^2 Z - \alpha\mu_0 Z_{,r} = 0. \quad (41)$$

Припустимо, що розглядається розв'язок у вигляді гармонічної хвилі вздовж вертикальної осі

$$R = \tilde{R}(r) e^{ikz}, \quad Z = \tilde{Z}(r) e^{ikz}. \quad (42)$$

Зауважимо, що умови (36) вже гарантують гармонічність і хвиля має стандартний вигляд

$$u_{r(z)}(r, z, t) = \bar{u}_{r(z)}(r, z) e^{-i\omega t} = \tilde{u}_{r(z)}(r) e^{-i(kz - \omega t)}, \quad (43)$$

Рівняння (40), (41) можна записати таким чином:

$$(\lambda_0 + 2\mu_0)[\tilde{R}_{,rrr} + (1/r)\tilde{R}_{,rr} - ((1/r^2) - k_{0L}^2)\tilde{R}_{,r}] + k^2\mu_0\tilde{R}_{,r} \quad (44)$$

$$-\alpha \{ (\lambda_0 + 2\mu_0)\tilde{R}_{,rr} + \lambda_0(1/r)\tilde{R}_{,r} \} + ik(\lambda_0 + \mu_0)\tilde{Z}_{,r} + ik\alpha\lambda_0\tilde{Z} = 0;$$

$$ik(\lambda_0 + \mu_0)\Delta_r \tilde{R} - \alpha ik\mu_0 \tilde{R} - \mu_0 \{ \Delta_r \tilde{Z} + (k_{0T}^2 - k^2((\lambda_0 + 2\mu_0)/\mu_0)) \tilde{Z} \} - \alpha \mu_0 \tilde{Z}_{,r} = 0, \quad (45)$$

$$\Delta_r f = f_{,rr} + (1/r)f_r$$

чи

$$L_{11}\tilde{R} + L_{12}\tilde{Z} = 0, \quad L_{21}\tilde{R} + L_{22}\tilde{Z} = 0. \quad (46)$$

Введемо далі функцію типу Лява  $\chi(r)$  за допомогою співвідношень

$$\tilde{R} = L_{22}\chi, \quad \tilde{Z} = -L_{11}\chi. \quad (47)$$

Тоді рівняння (44) задовольняється тотожно, а (45) трансформується в рівняння для знаходження функції  $\chi(r)$

$$\begin{aligned} & \Delta_r \Delta_r \tilde{\chi}_{,r} + \{ k_{oL}^2 + k_{oT}^2 - ((\mu_0/(\lambda_0 + 2\mu_0))k^2) \} \Delta_r \tilde{\chi}_{,r} + \\ & + (k_{0T}^2 - k^2((\lambda_0 + 2\mu_0)/\mu_0))(k_{0L}^2 - k^2(\mu_0/(\lambda_0 + 2\mu_0))) \tilde{\chi}_{,r} = \\ & = \alpha \{ \Delta_r \chi_{,rr} + M_{\Delta rr} \Delta_r ((1/r)\chi_r) + (\Delta_r \chi)_{,r} + M_{\Delta} \Delta_r \chi + M_{rr} \chi_{,rr} + M_r \chi_{,r} \} \end{aligned} \quad (48)$$

чи

$$\begin{aligned} & (\Delta_r - N^{2+})(\Delta_r - N^{2-})\chi_{,r} = \\ & = \alpha \{ \Delta_r \chi_{,rr} + M_{\Delta rr} \Delta_r ((1/r)\chi_r) + (\Delta_r \chi)_{,r} + M_{\Delta} \Delta_r \chi + M_{rr} \chi_{,rr} + M_r \chi_{,r} \}, \end{aligned} \quad (49)$$

де прийняті позначення

$$\begin{aligned} & N^{2\pm} = (1/2) \{ (\mu_0/(\lambda_0 + 2\mu_0))k^2 - k_{0L}^2 - k_{0T}^2 \} \times \\ & \times \left[ 1 \pm \sqrt{1 - 4 \frac{\{ (\mu_0/(\lambda_0 + 2\mu_0))k^2 - k_{0L}^2 - k_{0T}^2 \}^2}{(k^2((\lambda_0 + 2\mu_0)/\mu_0) - k_{0T}^2)(k^2(\mu_0/(\lambda_0 + 2\mu_0) - k_{0L}^2))}} \right] \end{aligned} \quad (50)$$

$$M_{\Delta rr} = \lambda_0/(\lambda_0 + 2\mu_0); \quad M_{\Delta r} = k^2(\lambda_0/(\lambda_0 + \mu_0)/\mu_0/(\lambda_0 + 2\mu_0)); \quad (51)$$

$$M_{rr} = k_{0T}^2 + k_{0L}^2 - k^2 \frac{\lambda_0^2 + 3\mu_0\lambda_0 + 4\mu_0^2}{\mu_0/(\lambda_0 + 2\mu_0)}; \quad M_r = [\lambda_0/(\lambda_0 + 2\mu_0)] [(\lambda_0 + 3\mu_0)/\mu_0] k^2 - k_{0T}^2.$$

Припустимо далі, що хвиля  $u(r, z, t) = \tilde{u}(r)e^{-i(kz - \omega t)}$  є поверхневою. Тоді один з розв'язків  $\tilde{\chi}(r)$  рівняння (48) повинен описуватися функціями, що загасають при збільшенні радіуса. В класичній задачі Біо це гарантується умовою додатності коефіцієнта  $m_L^2 = k^2(1 - (v/v_L)^2) > 0$  в рівнянні (13) і такими функціями є функції Макдональда.  $\chi(r) = K_m(nr)$ .

Якщо матеріал однорідний ( $\alpha = 0$ ), то права частина рівняння (48) дорівнює нулю і рівняння (48) перетворюється у класичне

$$(\Delta_r \chi - N^{2+}\chi)(\Delta_r \chi - N^{2-}\chi) = 0, \quad (52)$$

розв'язок якого є розв'язком задачі в рамках однорідної теорії пружності і він виражається через функцію Макдональда нульового індексу

$$\chi(r) = A^+ K_0(N^+r) + A^- K_0(N^-r). \quad (53)$$

При записі коефіцієнтів (51) припущено, що зміна фізичних властивостей матеріалу достатньо слабка і квадратами параметра загасання  $\alpha$  можна знехтувати.

Зміщення виражаються через потенціал  $\chi(r)$  таким чином:

$$u_{r(z)}(r, z, t) = -ik \{(\lambda_0 + \mu_0)\chi_{,rr} - \alpha\lambda_0\chi_{,r}\} e^{-i(kz - \omega t)}, \quad (54)$$

$$u_{r(z)}(r, z, t) = \{(\lambda_0 + 2\mu_0)[(\Delta_r\chi)_{,r} + (k_{0L}^2 - k^2(\mu_0/(\lambda_0 + 2\mu_0)))\chi_{,r}] - \alpha[(\lambda_0 + 2\mu_0)\chi_{,rr} + \lambda_0(1/r)\chi_{,r}]\} e^{-i(kz - \omega t)}. \quad (55)$$

При розв'язуванні рівняння (48) можна застосовувати різні методи, для яких важливо, що ліва частина рівняння є класичним лінійним виразом [3–6]. Тоді розв'язок при відсутності правої частини (коли малий параметр  $\alpha \in$  нулем) відомий.

Розглянемо, наприклад, процедуру знаходження розв'язку, що відповідає шостому доданку в правій частині (54)  $-\alpha M_r \chi_{,r}^{(1)}$ , і запишемо рівняння (48) з правою частиною лише з шостим доданком у вигляді

$$\Delta_r \Delta_r \tilde{\chi}_{,r} + \{k_{0L}^2 + k_{0T}^2 - (\mu_0/(\lambda_0 + 2\mu_0))k^2\} \Delta_r \tilde{\chi}_{,r} + \left\{ \begin{aligned} &k_{0T}^2 - k^2((\lambda_0 + 2\mu_0/\mu_0))(k_{0L}^2 - k^2(\mu_0/(\lambda_0 + 2\mu_0))) - \\ &-\alpha[(\lambda_0/(\lambda_0 + 2\mu_0))][((\lambda_0 + 3\mu_0/\mu_0)k^2 - k_{0T}^2)] \end{aligned} \right\} \tilde{\chi}_{,r} = 0. \quad (56)$$

Розв'язок цього рівняння відрізняється від розв'язку (53) більш складним виразом для аргументів функції Макдональда через наявність в (56) доданку з множителем  $\alpha$

$$\chi_{,r}(r) = A^+ K_0(N^{+(6\alpha)}r) + A^- K_0(N^{-(6\alpha)}r), \quad (57)$$

$$N^{2\pm(6\alpha)} = (1/2)[(\mu_0/(\lambda_0 + 2\mu_0))k^2 - k_{0L}^2 - k_{0T}^2] \times \left[ 1 \pm \sqrt{1 - 4 \frac{\{(\mu_0/(\lambda_0 + 2\mu_0))k^2 - k_{0L}^2 - k_{0T}^2\}^2 - \left\{ \begin{aligned} &(k^2((\lambda_0 + 2\mu_0/\mu_0) - k_{0T}^2)(k^2(\mu_0/(\lambda_0 + 2\mu_0)) - k_{0L}^2)) \right\}}{-\alpha[\lambda_0/(\lambda_0 + 2\mu_0)][((\lambda_0 + 3\mu_0/\mu_0)k^2 - k_{0T}^2)]}}}{}} \right].$$

Показана процедура може бути використана і для наближеного обчислення розв'язків, які відповідають решті п'яти доданків. Наближеність може бути основана на близькості графіків функцій Макдональда з індексами 1–4. Тоді загальний висновок щодо впливу слабкої неоднорідності матеріалу на параметри хвилі (хвильове число чи швидкість хвилі) полягає у тому, що згідно з формулами (57) ці параметри залежать від малого параметра неоднорідності і через малість параметра мало змінюються порівняно з випадком однорідного матеріалу. Більш визначена відповідь може бути отримана при числовому моделюванні.

## ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Biot M.A. Propagation of elastic waves in a cylindrical bore containing a fluid. *J Appl. Phys.*, 1952. **23**, № 9. P. 997–1005. doi: <https://doi.org/10.1063/1.1702365>
2. Olver F.W.J., Lozier D.W., Bousvert R.F., Clark C.W. (eds). NIST (National Institute of Standards and Technology). Handbook of Mathematical Functions. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2010. 968 p.
3. Achenbach J.D. Wave Propagation in Elastic Solids. Amsterdam: North-Holland, 1973. 425 p.
4. Viktorov I.A. Rayleigh and Lamb Waves. New York: Plenum Press, 1967. 168 p.
5. Rushchitsky J.J. Theory of waves in materials. Copenhagen: Ventus Publishing ApS, 2012. 270 p.
6. Rushchitsky J.J. Nonlinear Elastic Waves in Materials. Series: Foundations of engineering mechanics. Heidelberg: Springer, 2014. 454 p. doi: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-00464-8>
7. Lekhnitsky S.G. Theory of Elasticity of Anisotropic Elastic Body. San Francisco: Golden Day Inc., 1963. 404 p. doi: <https://doi.org/10.1137/1009023>
8. Kashtalyan M., Rushchitsky J.J. Revisiting displacement functions in three-dimensional elasticity of inhomogeneous media. *Int. J. Solids Struct.* 2009. **46**, № 18–19. P. 3463–3470. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2009.06.001>
9. Kashtalyan M., Rushchitsky J.J. General Love solution in the linear inhomogeneous isotropic theory of elasticity in dependence of elastic properties on radius. *Int. Appl. Mech.* 2010. **46**, № 3. P. 245–254. doi: <https://doi.org/10.1007/s10778-010-0304-6>
10. Kashtalyan M., Rushchitsky J.J. General Love solution in the linear inhomogeneous transversely isotropic theory of elasticity in dependence of elastic constants on radial coordinate. *Int. Appl. Mech.* 2010. **46**, № 4. P. 331–343. doi: <https://doi.org/10.1007/s10778-010-0304-6>

Надійшло до редакції 06.03.2019

## REFERENCES

1. Biot, M. A. (1952). Propagation of elastic waves in a cylindrical bore containing a fluid. *J Appl. Phys.*, 23, No. 9, pp. 997-1005. doi: <https://doi.org/10.1063/1.1702365>
2. Olver, F. W. J., Lozier, D. W., Bousvert, R. F. & Clark, C. W. (eds). (2010). NIST (National Institute of Standards and Technology). Handbook of Mathematical Functions. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 968 p.
3. Achenbach, J. D. (1973). Wave Propagation in Elastic Solids. Amsterdam: North-Holland, 425 p.
4. Viktorov, I. A. (1967). Rayleigh and Lamb Waves. New York: Plenum Press, 168 p.
5. Rushchitsky, J. J. (2012). Theory of waves in materials. Copenhagen: Ventus Publishing ApS, 270 p.
6. Rushchitsky, J. J. (2014). Nonlinear Elastic Waves in Materials. Series: Foundations of engineering mechanics. Heidelberg: Springer, 454 p. doi: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-00464-8>
7. Lekhnitsky, S. G. (1963). Theory of Elasticity of Anisotropic Elastic Body. San Francisco: Golden Day Inc., 404 p. doi: <https://doi.org/10.1137/1009023>
8. Kashtalyan, M. & Rushchitsky, J. J. (2009). Revisiting displacement functions in three-dimensional elasticity of inhomogeneous media. *Int. J. Solids Struct.*, 46, No. 18-19, pp. 3463-3470. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2009.06.001>
9. Kashtalyan, M. & Rushchitsky, J. J. (2010). General Love solution in the linear inhomogeneous isotropic theory of elasticity in dependence of elastic properties on radius. *Int. Appl. Mech.*, 46, No. 3, pp. 245-254. doi: <https://doi.org/10.1007/s10778-010-0304-6>
10. Kashtalyan, M. & Rushchitsky, J. J. (2010). General Love solution in the linear inhomogeneous transversely isotropic theory of elasticity in dependence of elastic constants on radial coordinate. *Int. Appl. Mech.*, 46, No. 4, pp. 331-343. doi: <https://doi.org/10.1007/s10778-010-0304-6>

Received 06.03.2019



Я.Я. Рушицкий

Институт механики НАН Украины им. С.П. Тимошенко, Киев  
E-mail: rushch@inmech.kiev.ua

### О ПОВЕРХНОСТНОЙ ВОЛНЕ ВДОЛЬ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ПОЛОСТИ В НЕОДНОРОДНОЙ УПРУГОЙ СРЕДЕ

Классическая задача Био о поверхностной гармонической упругой волне, распространяющейся вдоль свободной поверхности цилиндрической полости, обобщена на случай неоднородности среды распространения. Предположено, что плотность и упругие параметры Ляме среды изменяются с увеличением радиуса (уменьшаются при отходе от полости) по экспоненциальному закону. Используются предыдущие результаты об общих представлениях решений. Задача решена аналитически до того уровня, когда далее должны быть использованы числовые методы.

**Ключевые слова:** цилиндрическая поверхностная упругая волна, экспоненциально неоднородная среда, цилиндрическая поверхность, функции Макдональда, затухание гармонической волны.

J.J. Rushchitsky

S.P. Timoshenko Institute of Mechanics of NAS of Ukraine, Kiev  
E-mail: rushch@inmech.kiev.ua

### ON A SURFACE WAVE ALONG THE CYLINDRICAL CAVITY IN AN INHOMOGENEOUS ELASTIC MATERIAL

The classical Biot problem on a surface harmonic elastic wave propagating along the free surface of a cylindrical cavity is generalized to the case of inhomogeneity of a medium of propagation. It is assumed that the density and Lamé elastic parameters of the medium are changed with increasing the radius (they become smaller with moving from the cavity) by the exponential law. The prior results on a general representation of solutions are used. The problem is solved analytically up to the level, when the numerical methods have to be used.

**Keywords:** cylindrical surface elastic wave, exponentially inhomogeneous medium, cylindrical surface, Macdonald functions, attenuation of a harmonic wave.

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.05.034>

УДК 539.421

**М.Ф. Селіванов**

Інститут механіки ім. С.П. Тимошенка НАН України, Київ

E-mail: mfs@ukr.net

## Розв'язання задачі про крайову тріщину з зоною зчеплення шляхом регуляризації сингулярного інтегрального рівняння

Представлено членом-кореспондентом НАН України В.М. Назаренком

Розглянуто крайову тріщину нормального відриву в напівнескінченній площині. Зону передруйнування біля фронту тріщини описано за допомогою моделі зони зчеплення, в основі якої лежить нерівномірний закон зчеплення—відриву. Сингулярне рівняння з узагальненим ядром Коші, що дає розв'язок задачі, після регуляризації розв'язується колокаційним методом, який дозволив врахувати зв'язаність зчеплення та відриву. Представлений алгоритм розв'язання задачі також враховує умову плавності змикання берегів. Числовий приклад побудовано в умовах граничного стану для степеневому закону зчеплення—відриву з ділянкою зміцнення. Встановлено, що регуляризація при розв'язанні задачі практично не впливає на значення критичного навантаження.

**Ключові слова:** крайова тріщина, модель зони зчеплення, інтегральне рівняння з узагальненим ядром Коші, умова плавності змикання берегів тріщини.

У дослідженні [1], де інтегральне рівняння з узагальненим ядром Коші, що визначає розв'язок задачі про крайову тріщину, було розв'язано без регуляризації. Це призвело до осциляції розв'язку за певних законів зчеплення—відриву (ЗЗВ).

Розглянемо задачу про стан граничної рівноваги крайової тріщини в напівнескінченній площині за наявності зони передруйнування біля її фронту (рис. 1, а, де  $\lambda$  і  $\beta$  – вершини фізичної та фіктивної тріщин відповідно,  $\Delta(x)$  – розкриття тріщини). Тріщина розташована вздовж нормалі до границі півплощини, розподілене розтягувальне навантаження прикладене на значній відстані від тріщини вздовж нормалі до її площини.

Розв'язок задачі має вигляд (введені позначення ілюструє рис. 1, б)

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{\beta} K(\xi, \tau) \varphi(\tau) d\tau = L\psi(\xi), \quad 0 < \xi < \beta,$$
$$\psi(\xi) = \sigma_{\infty} - \sigma_{\max} \bar{T}[\bar{\Delta}(\xi)]H(\xi - \lambda), \quad \Delta(\xi) = \int_{\xi}^{\beta} \varphi(\tau) d\tau, \quad (1)$$
$$\Delta'(\beta) = 0,$$

© М.Ф. Селіванов, 2019

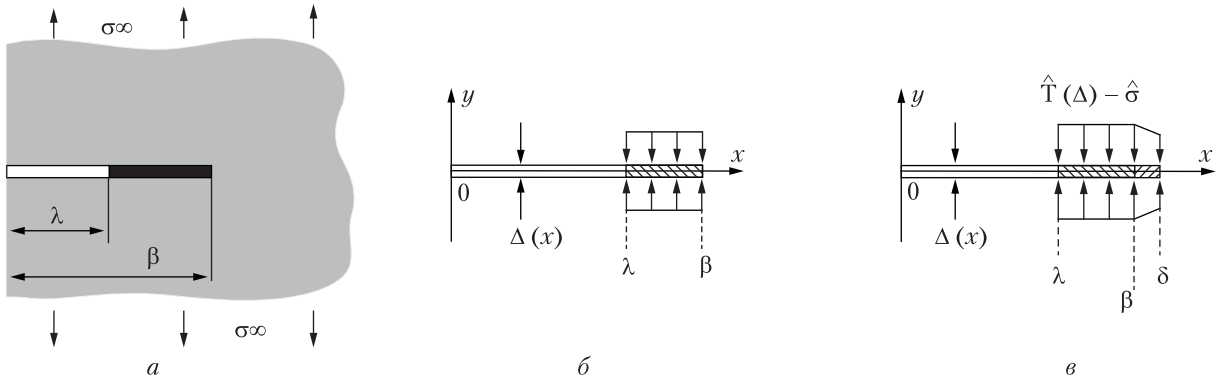


Рис. 1

$L = (\kappa + 1)/(2\mu)$  — пружна стала ( $\kappa$  — стала Колосова,  $\mu$  — модуль зсуву);  $H$  — функція Гевісайда;  $\bar{T}(\Delta)$  — заданий ЗЗВ;  $\bar{\Delta} = \Delta/\Delta_{\max}$  — безрозмірний відрив; міцність зчеплення  $\sigma_{\max}$  та критичний відрив  $\Delta_{\max}$  є фізичними параметрами моделі,

$$K(\xi, \tau) = \frac{1}{\tau - \xi} - h(\xi, \tau),$$

$$h(\xi, \tau) = \sum_{r=0}^2 d_r \xi^r \frac{\partial^r}{\partial \xi^r} \frac{1}{\tau + \xi}, \quad d = \{1, 6, 2\}.$$

Зауважимо, що окрім функції  $\phi$  в задачі (1) невідомою є і величина  $\beta$ . При дослідженні стану граничної рівноваги у визначальну систему (1) необхідно додати рівняння  $\Delta(\lambda) = \Delta_{\max}$ .

Форму функції  $h$  обрано для зручності подальшого аналізу. Більш звична форма запису цієї функції така:

$$h(\xi, \tau) = \frac{\tau^2 - 4\xi\tau - \xi^2}{(\tau + \xi)^3}.$$

Розділимо перше рівняння (1) на  $L\sigma_{\max}$ ; після заміни  $\tau = \beta t$ ,  $\xi = \beta x$ ,  $t, x \in [0, 1]$  отримаємо

$$B(f, x) = \tilde{\sigma}(x), \quad (2)$$

$$f(t) = \frac{\phi(\beta t)}{L\sigma_{\max}}, \quad \tilde{\sigma}(x) = \frac{\psi(\beta x)}{\sigma_{\max}}, \quad B(f, x) = \frac{1}{\pi} \int_0^1 K(x, t) f(t) dt.$$

Для регуляризації (2) розв'яжемо рівняння

$$\frac{1}{\pi} \int_0^1 \frac{f(t)}{t-x} dt = y(x), \quad (3)$$

вважаючи функцію

$$y(x) = \tilde{\sigma}(x) + \frac{1}{\pi} \int_0^1 h(x, t) f(t) dt$$

відомою. Розв'язок рівняння (3) є добре відомим [2]:

$$f(x) = -\frac{1}{\pi \tilde{X}(x)} \int_0^1 \frac{\tilde{X}(t) y(t)}{t-x} dt, \quad \tilde{X}(t) = \frac{(1-t)^{1/2}}{t^{1/2}}.$$

Підставимо

$$y(t) = \tilde{\sigma}(t) + \frac{1}{\pi_0} \int_0^1 h(t, s) f(s) ds$$

у вираз для  $f(x)$ . Враховуючи, що

$$\frac{1}{\pi_0} \int_0^1 \frac{\tilde{X}(t) h(t, s)}{t-x} dt = -\frac{R(x, s)}{s^{1/2}(1+s)^{3/2}},$$

$$R(x, s) = 5 - 7x + s + R_s(x, s), \quad R_s(x, s) = \sum_{r=0}^2 c_r(x) x^r \frac{\partial^r}{\partial x^r} \frac{1}{s+x},$$

$$c(x) = \{17x^2 - 19x + 3.5, \quad 2(7x - 4)(x - 1), \quad 2(x - 1)^2\},$$

отримаємо

$$f(x) = \frac{1}{\tilde{X}(x)} \left\{ \tilde{P}(x) + \frac{1}{\pi_0} \int_0^1 \frac{R(x, s) f(s)}{s^{1/2}(1+s)^{3/2}} ds \right\}, \quad (4)$$

де

$$\tilde{P}(x) = -\frac{1}{\pi_0} \int_0^1 \frac{\tilde{X}(t) \tilde{\sigma}(t)}{t-x} dt.$$

Зазначимо, що за сталої силової функції  $\tilde{\sigma}(x) = \tilde{\sigma}_0$  матимемо  $\tilde{P}(x) = \tilde{\sigma}_0$ . Ядро  $R$  можна подати у вигляді

$$R(x, s) = \frac{s^2(2s^2 + 10s + 7) - 2xs(4s^2 + 4s + 1) - x^2(2s^2 + 2s + 1)}{2(s+x)^3}.$$

Складова цього ядра  $R_s(x, t)$ , яку називають узагальненим ядром Коші, має стаціонарну сингулярність у лівому кінці інтервалу  $[0, 1]$ .

Перепишемо (4) у вигляді

$$\tilde{X}(x) f(x) - \frac{1}{\pi_0} \int_0^1 \frac{R(x, t) f(t)}{t^{1/2}(1+t)^{3/2}} dt = \tilde{P}(x).$$

Це рівняння можна подати у формі

$$a(x) u(x) - \frac{1}{\pi_0} \int_0^1 R(x, t) u(t) dt = \tilde{P}(x), \quad (5)$$

де

$$a(x) = (1-x)^{1/2}(1+x)^{3/2}, \quad u(x) = \frac{f(x)}{x^{1/2}(1+x)^{3/2}}.$$

Введемо вагову функцію  $x^b$  в (5) та запишемо характеристичне рівняння для визначення  $b$  (див. рівняння (25b) в [3]):

$$1 + \frac{1}{\sin \pi b} \{c_0(0) + c_1(0)b + c_2(0)b(b-1)\} = 0,$$

звідси  $b = -1/2$ . Таким чином, щоб виділити сингулярність у рівнянні (5) невідому функцію треба шукати у вигляді  $u(x) = q(x)/x^{1/2}$ , де  $q$  — регулярна функція. З метою врахування цього висновку та сингулярності в правому кінці інтервалу  $[0, 1]$  шукатиме невідому функ-

цію у вигляді

$$u(x) = \frac{q(x)}{\hat{X}(x)}, \quad \hat{X}(x) = [x(1-x)]^{1/2}.$$

Для врахування умови плавності змикання берегів (третій рядок в (1)) збільшимо дозину фіктивної тріщини з  $\beta$  до  $\delta$  та перепишемо силову функцію у вигляді (рис. 1, в)

$$\tilde{\sigma}(x) = \bar{\sigma}_\infty - \hat{T}[\bar{\Delta}(x)]H(x - \lambda/\delta) + \hat{\sigma}(x)H(x - \beta/\delta),$$

де  $\bar{\sigma}_\infty = \sigma_\infty/\sigma_{\max}$ ,  $\hat{T}(\bar{\Delta})$  – подовжене на від'ємний відрив зчеплення (безрозмірне)

$$\hat{T}(\bar{\Delta}) = \begin{cases} \bar{T}(\bar{\Delta}), & \bar{\Delta} \geq 0, \\ P(\bar{\Delta}), & \bar{\Delta} < 0, \end{cases} \quad \bar{\Delta}(x) = w \int_{x/\delta}^1 f(t) dt, \quad w = \frac{\delta L \sigma_{\max}}{\Delta_{\max}}, \quad (6)$$

допоміжне напруження  $\hat{\sigma}(x)$  визначається з умови  $\bar{\Delta}(x) \geq 0$ ,  $\beta/\delta \leq x < 1$ ; геометричний параметр  $\delta$  обирається таким чином, щоб напевне виконувалась умова  $\beta < \delta$ .

Рівняння (5) набуде вигляду

$$A(q, x) = \tilde{P}(x), \quad (7)$$

де ліва частина

$$A(q, x) = \frac{(1+x)^{3/2}}{x^{1/2}} q(x) - \frac{1}{\pi} \int_0^1 R(x, t) \frac{q(t)}{\hat{X}(t)} dt,$$

$$q(t) = \frac{f(t)}{\omega_1(t)}, \quad \omega_1(t) = \frac{(1+t)^{3/2}}{(1-t)^{1/2}},$$

а силова функція

$$\tilde{P}(x) = \bar{\sigma}_\infty - \bar{P}(x) + \hat{P}(x),$$

$$\bar{P}(x) = -\frac{1}{\pi} \int_{\lambda/\delta}^1 \frac{\tilde{X}(t) \hat{T}[\bar{\Delta}(x)]}{t-x} dt, \quad \hat{P}(x) = -\frac{1}{\pi} \int_{\beta/\delta}^1 \frac{\tilde{X}(t) \hat{\sigma}(t)}{t-x} dt. \quad (8)$$

Невідому регулярну функцію  $q$  визначатимемо з (7) у кусково-лінійній формі. Для знаходження параметрів функції  $q$  перепишемо ліву частину (7) у формі

$$A(q, x) = \frac{(1+x)^{3/2}}{x^{1/2}} q(x) - \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^n J_k(x) q_k,$$

де  $q_k$  – значення шуканої функції  $q(x)$  в квадратурних точках  $t_k$ ,

$$J_1(x) = t_2 Q'_1(x) - S'_1(x), \quad J_n(x) = -t_{n-1} Q'_{n-1}(x) + S'_{n-1}(x),$$

$$J_k(x) = t_{k+1} Q'_k(x) - t_{k-1} Q'_{k-1}(x) - S'_k(x) + S'_{k-1}(x), \quad k = 2, \dots, n-1,$$

$$Q'_k(x) = \frac{Q(x, t_{k+1}) - Q(x, t_k)}{\Delta t_k}, \quad S'_k(x) = \frac{S(x, t_{k+1}) - S(x, t_k)}{\Delta t_k},$$

$$Q(x, t) = \int \frac{R(x, t)}{\hat{X}(t)} dt, \quad S(x, t) = \int \frac{tR(x, t)}{\hat{X}(t)} dt.$$

Введемо позначення

$$I_{kr}(x, t) = \frac{\partial^r}{\partial x^r} \int \frac{t^k dt}{\hat{X}(t)(t+x)}, \quad k=0, 1, \quad r=0, 1, 2$$

та обчислимо наявні в ньому інтеграли:

$$I_{00}(x, t) = -\frac{2}{[x(1+x)]^{1/2}} \operatorname{arctg} \left[ \frac{x^{1/2} \tilde{X}(t)}{(1+x)^{1/2}} \right],$$

$$I_{01}(x, t) = -\frac{1}{x+1} \left[ \left( x + \frac{1}{2} \right) I_{00}(x, t) + \frac{\hat{X}(t)}{t+x} \right],$$

$$I_{02}(x, t) = \frac{1}{(x+1)^2} \left[ \left( 2x^2 + 2x + \frac{3}{4} \right) I_{00}(x, t) + \frac{8x^2 + 6tx + 3t + 5x}{2(t+x)^2} \hat{X}(t) \right];$$

$$I_{10}(x, t) = -xI_{00}(x, t) - I(t), \quad I(t) = 2 \operatorname{arctg} \tilde{X}(t),$$

$$I_{11}(x, t) = \frac{x}{1+x} \left[ -\frac{1}{2} I_{00}(x, t) + \frac{1}{t+x} \hat{X}(t) \right],$$

$$I_{12}(x, t) = \frac{x}{(1+x)^2} \left[ \left( x + \frac{1}{4} \right) I_{00}(x, t) - \frac{4x^2 + 2tx - t + x}{2(t+x)^2} \hat{X}(t) \right].$$

Тоді

$$Q(x, t) = \left( 7x - \frac{11}{2} \right) I(t) - \hat{X}(t) + \sum_{r=0}^2 c_r(x) I_{0r}(x, t),$$

$$S(x, t) = \left( 7x - \frac{23}{4} \right) \left\{ \frac{1}{2} I(t) + \hat{X}(t) \right\} - \frac{1}{2} t \hat{X}(t) + \sum_{r=0}^2 c_r(x) I_{1r}(x, t).$$

Неважко переконатись, що  $S(x, t_k)$  ( $k=1, \dots, n$ ) і  $Q(x, t_k)$  ( $k=2, \dots, n$ ) є обмеженими при  $x \rightarrow 0$ , а

$$Q(x, t_1) = -\frac{\pi}{x^{1/2}} + O(1),$$

отже

$$J_1(x) = \frac{\pi}{x^{1/2}} + O(1), \quad J_k(x) = O(1), \quad k=2, \dots, n.$$

В точках колокації  $x_m$  (які збігаються з квадратурними точками)

$$A(q, x_m) = \sum_{k=1}^n j_{mk} q_m, \quad j_{mk} = J_k(x_m) + \begin{cases} 0, & m=1, \\ \frac{(1+x_m)^{3/2}}{x_m^{1/2}} \delta_{mk}, & m>1, \end{cases}$$

де  $\delta_{mk}$  — символ Кронекера.

Права частина (7) міститиме вираз (див. (8))

$$\bar{P}(x) = -\frac{1}{\pi} \int_{\lambda/\delta}^1 \frac{\tilde{X}(t) \hat{T}[\bar{\Delta}(t)]}{t-x} dt, \quad \bar{\Delta}(t) = w \int_{t/\delta}^1 \omega_1(s) q(s) ds, \quad (9)$$

отримати квадратуру якого є досить складним завданням. Замість цього вважатимемо функцію  $\hat{T}[\bar{\Delta}(x)] - \hat{\sigma}(x)$  ( $\lambda < x < \delta$ ) лінійною на кожному квадратурному інтервалі, тоді

$$\tilde{P}(x) = \bar{\sigma}_\infty - \sum_{k=1}^{n-p} Z_k(x)(\bar{\sigma}_k - \hat{\sigma}_k), \quad \bar{\sigma}_k = \hat{T}[\bar{\Delta}(x_{p+k})], \quad (10)$$

$$Z_1(x) = T_1'(x) - Q_1(x), \quad Z_n(x) = -T_{n-1}'(x) + Q_n(x),$$

$$Z_k(x) = T_k'(x) - T_{k-1}'(x), \quad k = 2, \dots, n-1; \quad (11)$$

$$Q_k(x) = Q(x, t_k), \quad T_k'(x) = \frac{T_{k+1}(x) - T_k(x)}{t_{k+1} - t_k}, \quad T_k(x) = T(x, t_k);$$

$$Q(x, t) = \tilde{X}(x) \ln \left| \frac{\tilde{X}(t) - \tilde{X}(x)}{\tilde{X}(t) + \tilde{X}(x)} \right| + I(t),$$

$$T(x, t) = \tilde{Q}(x, t) + \frac{1}{2}I(t) - \hat{X}(t),$$

$$\tilde{Q}(x, t) = (t-x)Q(x, t) = \begin{cases} 0, & x=t, \\ \pi x, & t=0, \\ 2\hat{X}(t) - tI(t), & x=0. \end{cases}$$

Квадратура для  $\bar{\Delta}(x)$ :

$$\bar{\Delta}(x) = \omega Vq, \quad x = \{x_1, \dots, x_n\}^T,$$

де матриця  $V$  наведена в [1], причому у виразах (6)–(7) вказаної роботи функцію  $\omega$  треба змінити на  $\omega_1$ . Необхідні інтеграли

$$R(t) = \frac{3}{2}U(t) - \left(\frac{1}{2}t + 2\right)Y(t),$$

$$G(t) = \left(\frac{3}{2}t - 1\right)U(t) - \frac{1}{6}(t^2 + 6t - 10)Y(t),$$

де

$$U(t) = 2 \arctg \alpha^{-1}(t), \quad \alpha(t) = \frac{(1-t)^{1/2}}{(1+t)^{1/2}}, \quad Y(t) = (1-t^2)^{1/2}.$$

Дискретизація рівняння (7) набуває вигляду

$$Jq = \bar{\sigma}_\infty \mathbf{1} - Z[\hat{T}(\omega Vq) - \hat{\sigma}], \quad (12)$$

де  $\mathbf{1}$  –  $n \times 1$  вектор-стовпець одиниць,

$$J = [j_{mk}], \quad m, k = 1, \dots, n,$$

$$Z = [z_{mk}], \quad z_{mk} = Z_m(x_k), \quad m = 1, \dots, n, \quad k = 1, \dots, n-p,$$

$$q = \{q_1, \dots, q_{n-s}, \underbrace{0, \dots, 0}_s\},$$

$$\hat{T}(\omega Vq) = \{\bar{\sigma}_1, \dots, \bar{\sigma}_{n-p}\}, \quad \bar{\sigma}_k = \hat{T}(\omega V_{p+k}q),$$

$$\hat{\sigma} = \{\underbrace{0, \dots, 0}_{n-p-s}, \hat{\sigma}_1, \dots, \hat{\sigma}_s\},$$

елементи вектора-рядка  $\mathbf{V}_k$  є елементами  $k$ -го рядка матриці  $V$ , індекс  $p$  відповідає квадратурній точці  $x_p = \lambda/\delta$ .

Нелінійна система (12) містить  $n$  невідомих:  $n-s$  ненульових компонент вектора  $\mathbf{q}$  та  $s$  ненульових компонент вектора  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ . Щоб задовольнити умову плавності змикання береги необхідно вибрати індекс  $s$  таким чином, щоб для відповідного розв'язку системи (12) виконувалась нерівність

$$\mathbf{V}_{n-s}\mathbf{q} \geq 0.$$

Положення вершини зони зчеплення визначається з точністю до  $\Delta t$ :

$$\beta = x_{n-s}.$$

При дослідженні стану граничної рівноваги у визначальну систему (12) необхідно включити рівняння, яке відповідає критерію руйнування

$$w\mathbf{V}_p\mathbf{q} = 1$$

та додає в систему одну невідому  $\sigma_\infty = \sigma_\infty^*$ .

У числовому прикладі буде визначено напружено-деформований стан за умов саме граничного стану. З огляду на те, що відповідно до використаного ЗЗВ, максимальному відриву відповідатиме нульове зчеплення, матиме  $\hat{T}[\bar{\Delta}(x_p)] = 0$ , що враховано в (10).

Напруження на контурі тріщини визначаються інтегралом

$$\sigma(x) = -\frac{L\sigma_{\max}}{\pi} \int_0^1 K(x,t)w_1(t)q(t)dt = -\frac{L\sigma_{\max}}{\pi} \sum_{k=1}^n q_k J_k(x),$$

функції  $J_k(x)$  визначаються за схемою (11), де треба покласти

$$\begin{aligned} Q(x,t) &= \hat{Q}(x,t) + \check{Q}(x,t), \\ \hat{Q}(x,t) &= \int \frac{w_1(t)}{t-x} dt = \omega_1(x) \ln \left| \frac{\alpha(x) - \alpha(t)}{\alpha(x) + \alpha(t)} \right| + (x+2)U(t) - Y(t), \\ \check{Q}(x,t) &= \int h(x,t)w_1(t)dt = \sum_{r=0}^2 d_r x^r \hat{I}_r(x,t); \end{aligned} \tag{13}$$

функції

$$\hat{I}_r(x,t) = \frac{\partial^r}{\partial x^r} \int \frac{w_1(t)}{t+x} dt$$

після інтегрування набувають вигляду

$$\begin{aligned} \hat{I}_0(x,t) &= \alpha(x)W(x,t)(1-x) + (2-x)U(t) - Y(t), \\ \hat{I}_1(x,t) &= -\alpha(x)W(x,t) \frac{x+2}{x+1} - U(t) + \frac{\alpha^2(x)}{x+t} Y(t), \\ \hat{I}_2(x,t) &= \frac{1}{x+1} \left( \frac{3W(x,t)}{\alpha(x)(x+1)^2} - \left( \frac{x+4}{x+1} + \frac{1-x}{x+t} \right) \frac{Y(t)}{x+t} \right), \end{aligned}$$

де

$$W(x,t) = \ln \frac{1 - \alpha(x)\alpha(t)}{1 + \alpha(x)\alpha(t)}.$$



Випишемо другу визначальну функцію співвідношень (11):

$$T(x, t) = \hat{T}(x, t) + \check{T}(x, t),$$

$$\hat{T}(x, t) = \frac{x+1}{\alpha(x)}(t-x) \ln \left| \frac{\alpha(t) - \alpha(x)}{\alpha(t) + \alpha(x)} \right| + [(x+2)t - (x+1)^2 - \frac{1}{2}]U(t) + (x+2 - \frac{1}{2}t)Y(t),$$

$$\check{T}(x, t) = \int \check{Q}(x, t) dt = \sum_{r=0}^2 d_r x^r \check{I}_r(x, t).$$

Функції  $\check{I}_r(x, t) = \int \hat{I}_r(x, t) dt$  після інтегрування приймають вигляд

$$\check{I}_0(x, t) = \alpha(x)W(x, t)(1-x)(t+x) + [(2-x)t - (1-x)^2 - \frac{1}{2}]U(t) + (2-x - \frac{1}{2}t)Y(t),$$

$$\check{I}_1(x, t) = \alpha(x)W(x, t) \left[ 1-x - \frac{x+2}{x+1}(t+x) \right] + (2(1-x) - t)U(t) - \frac{2x}{x+1}Y(t),$$

$$\check{I}_2(x, t) = \alpha(x)W(x, t) \frac{3t-4+x+4x^2+2x^3}{(x+1)^2(1-x)} - 2U(t) + \left( \frac{1-x}{x+t} - \frac{x+4}{x+1} \right) \frac{Y(t)}{x+1}.$$

Окремо випишемо функції  $Q$  з (11):

$$Q_1(x) = \frac{1}{(x+1)^2} \left[ -\frac{2x(3x^3+4x^2-4x-8)}{Y(x)} \ln \frac{1-\alpha(x)}{1+\alpha(x)} + \right.$$

$$\left. + 4(\pi x^3 + (2\pi + \frac{3}{2})x^2 + (\pi+2)x - 1) \right], \quad Q_n(x) = 8\pi x.$$

Складові функції  $Q_1$  (див. (13)) є сингулярними, але, використовуючи асимптотичні властивості, знайдемо  $Q_1(0) = -4$ ,  $Q_1(1) = 4\pi$ . Також неважко отримати асимптотичні властивості функції  $T_k(x)$ .

Числовий приклад побудуємо для ЗЗВ із ділянкою зміцнення

$$\bar{T}(\bar{\Delta}) = (\bar{\sigma}_l \bar{\Delta} + \bar{\sigma}_n)(1 - \bar{\Delta})^2,$$

$$\Delta_{\max} = \frac{12\varphi}{\sigma_{\max}(\bar{\sigma}_l + 4\bar{\sigma}_n)}, \quad \frac{4}{27} \bar{\sigma}_l \left( 1 + \frac{\bar{\sigma}_n}{\bar{\sigma}_l} \right)^3 = 1.$$

На рис. 2 проілюстрована безрозмірна щільність розкриття  $q(x)$  (а), відносні зчеплення  $\hat{T}[\bar{\Delta}(x)] - \hat{\sigma}(x)$  та відрив  $\bar{\Delta}(x)$  (б) при  $\delta = 1$  см,  $\bar{\sigma}_n = 0,95$ ,  $\bar{\sigma}_l = 2,8406$ ,  $E = 40$  ГПа,  $\varphi = 200$  Н/м,  $\sigma_{\max} = 35$  МПа,  $n = 101$  (параметр дискретизації). Штриховою лінією на рис. 2, б зображена дискретизована величина  $\hat{T}[\bar{\Delta}(x)] - \hat{\sigma}(x)$  (напруження на лінії тріщини [4, 5, 1]), яка демонструє осциляцію відносно  $\sigma(x)$  на ділянці  $\beta < x < \delta$ . Але функція  $\hat{\sigma}(x)$  є допоміжною і не несе фізичного змісту. Натомість щільність розкриття  $q(x)$  не має осциляції на відміну від розв'язку задачі без регуляризації.

Критичне значення зовнішнього навантаження  $\sigma_{\infty}^* = 0,6021\sigma_{\max}$ . Цей параметр граничної рівноваги отримано на рівні  $0,6023\sigma_{\max}$  при розв'язанні задачі без регуляризації [1].

Таким чином, в роботі побудовано та проілюстровано прикладом числово-аналітичний метод теорії тріщин в рамках моделі зони зчеплення для випадку крайової тріщини. Інте-

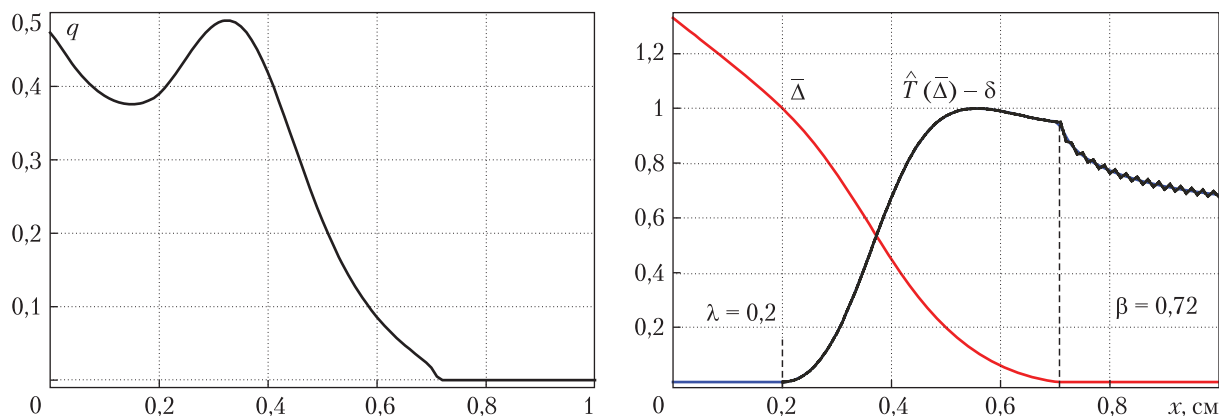


Рис. 2

гральне рівняння з узагальненим ядром Коші, яке дає розв'язок задачі, після регуляризації розв'язано методом колокацій. Квадратурні формули побудовано з урахуванням стаціонарної сингулярності зазначеного ядра. Використання регуляризації дозволило отримати фізично коректний (без осциляцій) розв'язок для щільності розкриття (функція  $\varphi$  в (1)). Встановлено, що обидві процедури розв'язання (з регуляризації та без неї) дають дуже близькі значення параметра граничної рівноваги, що за рахунок простоти реалізації робить числово-аналітичний алгоритм, представлений в [1], більш привабливим.

## ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Селіванов М.Ф. Крайова тріщина із зоною зчеплення. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2019. № 3. С. 46–54. doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.03.46>
2. Muskhelishvili N.I. Some basic problems of the mathematical theory of elasticity. Groningen: Noordhoff, 1953.
3. Savruk M.P., Madenci E., Shkarayev S. Singular integral equations of the second kind with generalized Cauchy-type kernels and variable coefficients. *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 1999. 45. P. 1457–1470.
4. Selivanov M.F., Chornoivan Y.O. A semi-analytical solution method for problems of cohesive fracture and some of its applications. *Int. J. Fract.* 2018. 212. № 1. P. 113–121.
5. Selivanov M.F., Chornoivan Y.O., Kononchuk O.P. Determination of crack opening displacement and critical load parameter within a cohesive zone model. *Continuum Mech. Thermodyn.* 2018. doi: <http://doi.org/10.1007/s00161-018-0712-0>

Надійшло до редакції 23.01.2019

## REFERENCES

1. Selivanov, M. F. (2019). An edge crack with cohesive zone. *Dopov. Nac. acad. nauk Ukr.*, 2019, No. 3: pp. 46–54 (in Ukrainian). doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.03.46>
2. Muskhelishvili, N. I. (1953). Some basic problems of the mathematical theory of elasticity. Groningen: Noordhoff.
3. Savruk, M. P., Madenci, E. & Shkarayev, S. (1999). *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 45, pp. 1457-1470.
4. Selivanov, M. F. & Chornoivan, Y. O. (2018). A semi-analytical solution method for problems of cohesive fracture and some of its applications. *Int. J. Fract.*, 212, 1, pp. 113-121.
5. Selivanov, M. F., Chornoivan, Y. O. & Kononchuk, O. P. (2018). Determination of crack opening displacement and critical load parameter within a cohesive zone model. *Continuum Mech. Thermodyn.* doi: <http://doi.org/10.1007/s00161-018-0712-0>

Received 23.01.2019

М.Ф. Селиванов

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

E-mail: mfs@ukr.net

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О КРАЕВОЙ ТРЕЩИНЕ С ЗОНОЙ СЦЕПЛЕНИЯ  
ПРИ ПОМОЩИ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ СИНГУЛЯРНОГО ИНТЕГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ

Рассмотрено крайовую трещину нормального отрыва в полубесконечной плоскости. Зону предразрушения у фронта трещины описано при помощи модели зоны сцепления, в основе которой лежит неравномерный закон сцепления–отрыва. Сингулярное интегральное уравнение с обобщенным ядром Коши после регуляризации решается методом коллокаций, который позволил учесть связанность сцепления и отрыва. Построенный алгоритм решения задачи также учитывает условие плавности смыкания берегов. Числовой пример построен в условиях предельного состояния для степенного закона сцепления–отрыва с участком упрочнения. Установлено, что регуляризация при решении задачи практически не влияет на значение критической нагрузки.

**Ключевые слова:** *краевая трещина, модель зоны сцепления, интегральное уравнение с обобщённым ядром Коши, условие плавности смыкания берегов трещины.*

M.F. Selivanov

S.P. Timoshenko Institute of Mechanics of the NAS of Ukraine, Kiev

E-mail: mfs@ukr.net

SOLVING A PROBLEM ON AN EDGE CRACK WITH COHESIVE ZONE  
BY THE REGULARIZATION OF A SINGULAR INTEGRAL EQUATION

An edge mode I crack in a semiinfinite plane is considered. The fracture zone at the front of the crack is modeled with the use of the cohesive zone model, which is based on the non-uniform traction-separation law. The singular integral equation with a generalized Cauchy kernel is solved by the collocation method after the regularization, using the method allowing us to consider the coupling of traction and separation. The constructed algorithm for solving the problem also includes the condition of smooth crack closure. The numeric example is built, by meeting the limiting equilibrium condition for the power traction–separation law with a hardening segment. It is established that the regularization in solving the problem has no effect on the value of critical loading.

**Keywords:** *edge crack, cohesive zone model, integral equation with a generalized Cauchy kernel, condition of smooth crack closure.*

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.05.044>

УДК 539.3

**М.П. Семенюк<sup>1</sup>, В.М. Трач<sup>2</sup>, Н.Б. Жукова<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Інститут механіки ім. С.П. Тимошенка НАН України, Київ

<sup>2</sup> Національний університет водного господарства та природокористування, Рівне

E-mail: zhukova\_n@ukr.net, trach-vm@ukr.net

## **Деформування тришарових циліндричних оболонок з трансверсально пружним заповнювачем в околі критичного стиску**

*Представлено членом-кореспондентом НАН України В.М. Назаренком*

*З використанням асимптотичного методу Коїтера—Будянського розроблено процедуру розв'язання задачі стійкості і закритичної поведінки тришарової оболонки з легким заповнювачем, що має пружність тільки в трансверсальному напрямку. Розв'язувальна система нелінійних рівнянь введена з урахуванням дискретності структури, що дозволяє розглядати загальні та локальні варіанти форм втрати стійкості. Виконано розрахунок конструкцій, що складаються з двох циліндричних вуглепластикових оболонок, які взаємодіють за допомогою пружинного заповнювача.*

**Ключові слова:** тришарові оболонки, стійкість, трансверсально пружний заповнювач, асимптотичний метод, закритична поведінка

На відміну від типових тришарових структур, що розглядалися раніше [1–5], в даний час виникла потреба у вивченні тришарових оболонок з середнім шаром, який можна уявити як тіло, що має пружність тільки в трансверсальному напрямку. Якщо зовнішні шари взаємодіють за допомогою перпендикулярних до їхньої поверхні пружин, то еквівалентне континуальне тіло буде мати зазначені властивості. У роботі [6] модель пружин між шарами двошарової нанотрубки використовується для врахування взаємодії, що обумовлена силою відштовхування—притягнення Ван дер Ваальса. Стійкість і початкова закритична поведінка одношарових циліндричних оболонок із заповнювачем розглядалась в роботі [7].

Ми будемо досліджувати стійкість тришарових оболонок із середнім шаром пружинного типу. Вплив такого заповнювача на критичні навантаження і характер початкової закритичної поведінки тришарових оболонок є предметом вивчення представленої статті.

**Нелінійні рівняння рівноваги тришарових оболонок.** При виведенні нелінійних рівнянь рівноваги тришарових оболонок будемо виходити з варіаційного принципу Лагранжа

$$\delta V - \delta A = 0, \tag{1}$$

де  $V$  — потенціальна енергія деформації оболонки;  $A$  — робота зовнішнього навантаження. Енергія  $V$  складається з енергій зовнішнього шару —  $V_1$ , внутрішнього шару —  $V_2$ , а також

енергії середнього шару. Відповідно до гіпотез Тимошенка для потенціальної енергії деформації  $V_i$  ( $i = 1, 2$ ) буде справедливим вираз

$$V_i = \frac{1}{2} \int_0^L \int_0^{2\pi} (T_{11,i} \varepsilon_{11,i} + T_{12,i} \varepsilon_{2,i} + T_{22,i} \varepsilon_{22,i} + T_{13,i} \varepsilon_{31,i} + T_{23,i} \varepsilon_{231,i} + M_{11,i} k_{11,i} + M_{12,i} k_{12,i} + M_{22,i} k_{22,i}) R_i dx d\varphi, \quad (2)$$

де  $L$  – довжина оболонки;  $R_i$  – радіус серединної поверхні  $i$ -го шару;  $T_{mn,i}$ ,  $M_{mn,i}$  – зусилля і моменти, еквівалентні чинним в шарах напруженням;  $\varepsilon_{mn,i}$  – деформації;  $m, n$  – індекси,  $k_{mn,i}$  – приріст кривин і кручення.

Зв'язок між силовими і деформаційними функціями задається у вигляді закону Гука [8].

Нелінійні вирази деформацій через переміщення приймаються у вигляді, що відповідає теорії Муштарі–Доннелла–Власова (МДВ)

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} &= \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{2} \theta_1^2; & \varepsilon_{12} &= \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} + \theta_1 \theta_2; & \varepsilon_{22} &= \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{w}{R_i} + \frac{1}{2} \theta_2^2; & \varepsilon_{13} &= \theta + \theta_1; \\ \varepsilon_{23} &= \psi + \theta_2; & \varepsilon_{33} &= \frac{\partial w}{\partial z}; & \theta_1 &= \frac{\partial \theta}{\partial x}, & \theta_2 &= \frac{\partial \theta}{\partial y}; & k_{11} &= \frac{\partial \theta}{\partial x}; & k_{12} &= \frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial \psi}{\partial x}; & k_{22} &= \frac{\partial \psi}{\partial x}, \end{aligned} \quad (3)$$

де  $u, v$  – тангенціальні переміщення;  $w$  – переміщення по нормалі, додатний напрямком якої визначається до центру кола;  $\theta, \psi$  – кути повороту;  $y = R_i \varphi$  – для  $i$ -го шару.

Середній шар (3-й) передбачається абсолютно податливим у всіх напрямках, крім трансверсального (вісь  $z$ ). Початок осі лежить на серединній поверхні цього шару. В такому випадку потенціальна енергія 3-го шару визначається виразом

$$V_3 = \frac{1}{2} \int_0^L \int_0^{2\pi} \int_{-\frac{t_3}{2}}^{\frac{t_3}{2}} \sigma_{33} \varepsilon_{33} R_3 dx d\varphi dz. \quad (4)$$

З співвідношень теорії пружності і умов контакту при  $z = -\frac{t_3}{2}$  і  $z = \frac{t_3}{2}$

$$w_1 = w_0 - \frac{t_3}{2} \chi; \quad w_2 = w_0 + \frac{t_3}{2} \chi.$$

отримуємо переміщення середнього шару

$$w_0 = \frac{w_1 + w_2}{2}; \quad \chi = \frac{w_2 - w_1}{t_3}. \quad (5)$$

Отже,

$$\varepsilon_{33} = \frac{w_2 - w_1}{t_3}; \quad T_{33} = t_3 \sigma_{33} = E_3 t_3 \varepsilon_{33} = E_3 (w_2 - w_1);$$

$$V_3 = \frac{1}{2} \int_0^L \int_0^{2\pi} \frac{E_3}{t_3} (w_2 - w_1)^2 R_3 dx d\varphi. \quad (6)$$

В роботі [9] показано, що відношення  $\frac{E_3}{t_3}$  дорівнює коефіцієнту податливості двовимірної основи товщиною  $t_3$  без урахування поперечних напружень. Нехай  $S_3 = E_3/t_3$ .

З використанням співвідношень (2)–(6) з варіаційного принципу (1), коли в якості незалежних функцій приймаються переміщення  $u_i, v_i, w_i$  і кути  $\theta_i, \psi_i$ , отримуємо 10 рівнянь в частинних похідних від вказаних функцій. У варіанті теорії оболонки, що використовується, застосування виразів тангенціальних деформацій через зусилля дозволяє скоротити розв'язувальну систему диференціальних рівнянь до 8-ми. Ця система буде мати змішаний вид, так як вона буде містити похідні не тільки від переміщень, але і від функції зусиль. Вважаємо, що в функціоналі (2), крім переміщень  $u, v, w$ , незалежними будуть також тангенціальні зусилля  $T_{11}, T_{12}, T_{22}$ . Для деформацій маємо

$$\varepsilon_{11} = \frac{1}{\Delta}(T_{11}C_{22} - T_{12}C_{12}), \quad \varepsilon_{22} = \frac{1}{\Delta}(-T_{11}C_{12} + T_{22}C_{11}), \quad \varepsilon_{12} = \frac{1}{C_{66}}T_{12}, \quad \Delta = C_{11}C_{22} - C_{12}^2.$$

Складова функціоналу (2) буде мати вигляд

$$\begin{aligned} V = & \frac{1}{2} \int_0^L \int_0^{2\pi} \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{2} \theta_1^2 \right) T_{11} + \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} + \theta_1 \theta_2 \right) T_{12} + \left( \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{1}{2} \theta_2^2 \right) T_{22} - \right. \\ & - \frac{1}{C_{11}C_{22} - C_{12}^2} (C_{22}T_{11}^2 + C_{11}T_{22}^2 - 2C_{12}T_{11}T_{22}) - \frac{1}{C_{66}} T_{12}^2 + C_{13} \left( \theta + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + C_{23} \left( \psi + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 + \\ & \left. + D_{11} \left( \frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + 2D_{12} \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial y} + D_{22} \left( \frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 + D_{66} \left( \frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 \right] dx dy. \end{aligned} \quad (7)$$

Тут індекс “2” опускається, оскільки вираз (7) справедливий для обох несучих шарів. Введемо функцію зусиль  $F$ , прийнявши

$$T_{11} = \frac{\partial^2 F}{\partial y^2}; \quad T_{12} = -\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y}; \quad T_{22} = \frac{\partial^2 F}{\partial x^2}.$$

З огляду на те, що переміщення середнього шару, деформації  $\varepsilon_{33}$  та зусилля  $T_{33}$  виражаються за допомогою співвідношень (5), варіюваними в функціоналі варіаційного принципу Лагранжа (1) будуть функції  $F_1$  і  $F_2$ , прогини  $w_1$  і  $w_2$ , функції  $\theta_1, \theta_2$  і  $\psi_1, \psi_2$ . Внаслідок цього варіаційне рівняння набуває вигляду

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^2 \int_0^L \int_0^{2\pi} \left\{ L_1(w_i, F_i) + \frac{1}{R_i} \frac{\partial^2 w_i}{\partial x^2} - \frac{1}{2} (w_i, w_i) \right\} \delta F_i + \\ & + [L_2(w_i, F, \theta_i, \psi_i) + (F_i, w_i) + q_i] \delta w_i + L_3(\theta_i, \psi_i, w_i) \delta \theta_i + L_4(\theta_i, \psi_i, w_i) \delta \psi_i \} R_i dx d\varphi - \\ & - \sum_{i=1}^2 \int_0^{2\pi} \left[ \left( \frac{1}{R_i^2} \frac{\partial^2 F_i}{\partial \psi^2} + T_{11,0}^i \right) \delta w \right] \Big|_0^L R_i d\varphi = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Передбачається, що до торцевих перерізів кожного шару прикладені стискаючі зусилля  $T_{11,i} = T_{11}^0$ , а поверхневий тиск  $q$  – тільки до поверхні першого шару. В (8) використані наступні позначення диференціальних операторів  $L_i(\cdot)$  розв'язувальних функцій

$$L_1(\cdot) = \left( A_{11} \frac{\partial^4}{\partial x^4} + 2A_{12} \frac{\partial^4}{R^2 \partial x^2 \partial \varphi^2} + A_{22} \frac{\partial^4}{R^4 \partial \varphi^4} \right) F_i + \frac{1}{R_i} \frac{\partial^2 w_i}{\partial x^2};$$

$$\begin{aligned}
 L_2() &= \left[ D_{11} \frac{\partial^3}{\partial x^3} + \frac{1}{R^2} (D_{12} + 2D_{16}) \frac{\partial^3 \theta}{\partial x \partial \varphi^2} \right] \theta_i + \left[ \frac{1}{R_i} (D_{12} + 2D_{66}) \frac{\partial^3}{\partial x^2 \partial \varphi} + \frac{1}{R_i^3} \frac{\partial^3}{\partial \varphi^3} \right] \Psi_i + \\
 &+ \frac{1}{R_i} \frac{\partial^2 F_i}{\partial x^3} - (-1)^i C (\omega_2 - \omega_1) \frac{R_3}{R_i}; \\
 L_3() &= \left( D_{11} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{R_i^2} D_{66} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \theta_i + \frac{1}{R_i} (D_{12} + D_{66}) \frac{\partial^2 \Psi_i}{\partial x \partial \varphi} - C_{55} \left( \theta_i + \frac{\partial \omega_i}{\partial x} \right); \\
 L_4() &= \frac{1}{R_i} (D_{12} + D_{66}) \frac{\partial^2 \theta_i}{\partial x \partial \varphi} + \left( D_{66} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{R_i^2} D_{22} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \Psi_i - C_{44} \left( \Psi_i + \frac{1}{R_i} \frac{\partial \omega_i}{\partial \varphi} \right). \tag{9}
 \end{aligned}$$

У виразах  $L_1$  є коефіцієнти

$$A_{11} = \frac{C_{11}}{\Delta}; \quad A_{12} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{C_{66}} - \frac{2C_{12}}{\Delta} \right); \quad A_{66} = \frac{C_{22}}{\Delta}; \quad \Delta = C_{11}C_{22} - C_{12}^2.$$

Оператор  $(,)$  має вигляд

$$(F, \omega) = \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \varphi^2} \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} - \frac{2}{R^2} \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial \varphi} \frac{\partial \omega}{\partial x \partial \varphi} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \omega}{\partial \varphi^2}.$$

Прирівнюючи до нуля вирази при варіаціях  $\delta F_i, \delta \omega_i, \delta \theta_i, \delta \Psi_i$ , з варіаційного рівняння (8) отримуємо, вісім нелінійних диференціальних рівнянь:

$$\begin{aligned}
 L_1(F_i) + \frac{1}{2} (\omega_i, \omega_i) &= 0; \quad L_2(\theta_i, \Psi_i) + (F_i, \omega_i) = q, \\
 L_3(\theta_i, \Psi_i, \omega_i) &= 0; \quad L_4(\theta_i, \Psi_i, \omega_i) = 0, \quad i = 1, 2. \tag{10}
 \end{aligned}$$

Використовуючи ці рівняння, можемо досліджувати напружено-деформований стан оболонки на всій траєкторії деформування, включаючи граничні точки, точки біфуркації, закритичну поведінку. Нижче, вважаючи докритичний стан безмоментним, обмежимося розрахунком критичного навантаження і початкової закритичної поведінки в околі критичної точки. Для цього скористаємося асимптотичним методом Койтера [10] в альтернативному варіанті Будянського [11, 12]. Вважаємо, що навантаження на оболонку змінюється пропорційно параметру  $\lambda$ . Навантаження біфуркації визначається значенням цього параметра  $\lambda_c$ . Рівноважний стан оболонки після проходження критичної точки визначається змінним значенням параметра  $\lambda$ , характер якого можна описати за допомогою асимптотичного розкладу

$$\lambda = \lambda_c (1 + a\xi + b\xi^2 + \dots) \tag{11}$$

Таким чином, при відомому значенні параметра  $\lambda_c$ , згідно з теорією [10], закритичну поведінку оболонки можна визначити, якщо знайти значення коефіцієнтів  $a$  і  $b$  ряду (11).

Відповідно до [12], представимо розв'язувальні функції, щодо яких записані рівняння (10), у вигляді асимптотичних рядів за ступенями малого параметра

$$\begin{bmatrix} F_i \\ \omega_i \\ \theta_i \\ \Psi_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_{i,0} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \xi \begin{bmatrix} F_{i,1} \\ \omega_{i,1} \\ \theta_{i,1} \\ \Psi_{i,1} \end{bmatrix} + \xi^2 \begin{bmatrix} F_{i,2} \\ \omega_{i,2} \\ \theta_{i,2} \\ \Psi_{i,2} \end{bmatrix} + \xi^3 \begin{bmatrix} F_{i,3} \\ \omega_{i,3} \\ \theta_{i,3} \\ \Psi_{i,3} \end{bmatrix}, \tag{12}$$

де  $\xi$  – малий параметр-амплітуда моди випучування, перший індекс  $i$  визначає номер шару ( $i = 1, 2$ ), другий – номер члена в розкладах. При осьовому стиску зусиллями  $T_{11,0}^i$  і зовнішньому тиску інтенсивністю  $q$  докритичний напружений стан оболонки буде

$$\frac{\partial^2 F_{i,0}}{R_i^2 \partial \varphi^2} = -\lambda a_t; \quad \frac{\partial^2 F_{i,0}}{\partial x^2} = -\lambda a_q; \quad \frac{\partial^2 F_{i,0}}{R_i \partial x \partial \varphi} = 0, \quad (13)$$

де параметр  $\lambda$  має розмірність зусилля, а коефіцієнти  $a_t$  і  $a_q$  визначають співвідношення між зусиллями в осьовому і окружному напрямках, знак “мінус” позначає, що зусилля – стискаючі.

Підставимо ряди (12) у варіаційне рівняння (8). Прирівнюючи до нуля вирази при ступенях параметра  $\xi$ , отримаємо послідовність формулювань задач щодо функцій, які є коефіцієнтами вказаних рядів (12). При першому ступені матимемо варіаційне рівняння рівноваги в точці, де основна траєкторія перетинається з траєкторією іншого розв'язку нелінійних рівнянь. Однорідна задача щодо функцій з індексом “1” виводиться з рівняння

$$\sum_{i=1}^2 \int_0^{L} \int_0^{2\pi} \{L_1(F_{i,1}, \dots) \delta F_{i,1} + [L_2(F_{i,1}, \dots) + \lambda_c(F_{i,0}, w_{i,1})] \delta w_{i,1} + L_3(w_{i,1}, \dots) \delta \theta_{i,1} + L_4(w_{i,1}) \delta \psi_{i,1}\} R_i dx d\varphi = 0. \quad (14)$$

При врахуванні виразу (13) дужка набуває вигляду

$$\lambda(F_{i,0}, w_{i,1}) = -\lambda_c \left( a_t \frac{\partial^2 w_{i,1}}{\partial x^2} + a_q \frac{\partial^2 w_{i,1}}{R_i^2 \partial \varphi^2} \right). \quad (15)$$

Варіації функції в рівнянні (14) можуть приймати значення коефіцієнтів в розкладах (12). В результаті отримаємо співвідношення їх ортогональності в такому вигляді:

$$\sum_{i=1}^2 \int_0^L \int_0^{2\pi} \{L_1(F_{i,1}, w_{i,1}) F_{i,n} + [L_2(F_{i,1}, \dots) - \lambda(F_{i,1}, w_{i,1})] w_{i,n} + L_3(w_{i,1}, \dots) \theta_{i,n} + L_4(w_{i,1}) \psi_{i,n}\} R_i dx d\varphi = 0. \quad (16)$$

Звідси одержуємо також інший вигляд цього співвідношення

$$\sum_{i=1}^2 \int_0^L \int_0^{2\pi} \{L_1(F_{i,n}, w_{i,n}) F_{i,1} + [L_2(F_{i,n}, \dots) - \lambda(F_{i,n}, w_{i,1})] w_{i,1} + L_3(w_{i,n}, \dots) \theta_{i,1} + L_4(w_{i,n}) \psi_{i,1}\} R_i dx d\varphi = 0. \quad (17)$$

Використовуємо умови (17) для знаходження коефіцієнтів  $a$  і  $b$  в розкладі (11). Розглянемо співвідношення, з якого можна отримати значення коефіцієнта  $a$ . При  $\xi^2$  матимемо

$$\sum_{i=1}^2 \int_0^L \int_0^{2\pi} \left\{ \left[ L_1(F_{i,2}, \dots) + \frac{1}{2}(w_{i,1}, w_{i,1}) \right] F_{i,1} + [L_2(w_{i,2}, \dots) - a \lambda_c(F_{i,0}, w_{i,2}) + (F_{i,1}, w_{i,2})] w_{i,1} + L_3(w_{i,2}, \dots) \theta_{i,1} + L_4(w_{i,2}, \dots) \psi_{i,1} \right\} R_i dx d\varphi = 0. \quad (18)$$



З огляду на умови (17) при  $n = 2$ , а також, що

$$\int_0^{2\pi} \int_0^L \left[ \frac{1}{2} (w_{i,1}, w_{i,1}) F_{i,1} + (F_{i,1}, w_{i,1}) w_{i,1} \right] R_i dx d\varphi = 0,$$

з (18) знаходимо  $a = 0$ .

Аналогічний інтеграл при  $\xi^3$  набуває вигляду

$$\sum_{i=1}^2 \int_0^{2\pi} \int_0^L \left\{ L_1(F_{i,3}, \dots) (w_{i,1}, w_{i,2}) F_{i,1} + [L_2(w_{i,3}, \dots) - \lambda_c (F_{i,0}, w_{i,3}) + (F_{i,1}, w_{i,2}) + (F_{i,2}, w_{i,1}) - \lambda_c b (F_{i,0}, w_{i,1}) w_{i,1} + L_3(F_{i,3}, \dots) \theta_{i,1} + L_4(w_{i,3}, \dots) \psi_{i,1}] R_i \right\} dx d\varphi = 0.$$

Якщо врахувати умови ортогональності (17), отримаємо

$$\sum_{i=1}^2 \int_0^{2\pi} \int_0^L \left\{ (w_{i,1}, w_{i,2}) F_{i,1} + [(F_{i,1}, w_{i,2}) + (F_{i,2}, w_{i,1})] w_{i,1} - \lambda_c b (F_{i,0}, w_{i,1}) w_{i,1} \right\} R_i dx d\varphi = 0.$$

Ці рівняння дозволяють обчислити коефіцієнт  $b$ , що визначає характер початкової за- критичної поведінки даної оболонки. При відомих розв'язках однорідної задачі (14) і нео- однорідною (18) знайдемо

$$b = -\frac{B}{\lambda_c A}, \quad (19)$$

де

$$B = \sum_{i=1}^2 \int_0^{2\pi} \int_0^L \left\{ [(w_{i,1}, w_{i,2}) F_{i,1} + (F_{i,1}, w_{i,2})] w_{i,1} + (F_{i,2}, w_{i,1}) w_{i,1} \right\} R_i dx d\varphi;$$

$$A = \sum_{i=1}^2 \int_0^{2\pi} \int_0^L (F_{i,0}, w_{i,1}) w_{i,1} R_i dx d\varphi. \quad (20)$$

**Розв'язок задачі стійкості і початкової закритичної поведінки.** Для розрахунку кри- тичного значення параметра навантаження скористаємось варіаційним рівнянням (14). При заданих граничних умовах, з огляду на сталість коефіцієнтів при шуканих функціях, розв'язок можна представити у вигляді одного члена тригонометричного ряду. Матимемо

$$F_{i,1} = B^i \sin l_m x \cos n\varphi, \quad w_{i,1} = C^i \sin l_m x \cos n\varphi,$$

$$\theta_{i,1} = D^i \cos l_m x \cos n\varphi, \quad \psi_{i,1} = E^i \sin l_m x \sin n\varphi, \quad (21)$$

для зовнішнього ( $i = 1$ ) і внутрішнього ( $i = 2$ ) шарів, де

$$l_m = \frac{m\pi}{L}, \quad m = 1, 2, \dots, \quad n = 2, 3, \dots$$

Після підстановки (21) в рівняння (20) і виконання необхідних процедур отримаємо систему однорідних алгебраїчних рівнянь

$$[X_{ij}] \bar{Y} = 0, \quad i, j = 1, \dots, 8; \quad \bar{Y} = (B^1, C^1, D^1, E^1, B^2, C^2, D^2, E^2), \quad (22)$$

Рівняння (22) використовуються для знаходження критичного значення параметра  $\lambda_c$  і хвильових чисел  $m$  і  $n$ , що визначають форму вигину при біфуркації.

Записуючи систему рівнянь відносно функцій з індексом “2” обмежимося тільки 1-м і 2-м, 5-м і 6-м, так як рівняння (3), (4), (7), (8) залишаються однорідними такого ж вигляду, що і в попередній задачі. При  $a = 0$  будемо мати

$$\begin{aligned} L_1(F_{i,2}) &= \frac{1}{2}(\omega_{i,1}, \omega_{i,1}); \\ L_2(\omega_{i,2}, \dots) - \lambda_c(F_{i,0}, \omega_{i,1}) &= -(F_{i,1}, \omega_{i,1}). \end{aligned} \quad (23)$$

При  $i=1$  це буде 1-е і 2-е рівняння вихідної системи, а при  $i=2$  — 5-е і 6-е рівняння. При підстановці виразів (21) для біфуркаційних функцій  $\omega_{i,1}$  і  $F_{i,1}$  в (23) для правих частин отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(\omega_{i,1}, \omega_{i,1}) &= \gamma_1^{(i)} \left( \sum_k b_k \sin l_k x - \cos 2n\varphi \sum_k c_k \sin l_k x \right); \\ (F_{i,1}, \omega_{i,1}) &= \gamma_1^{(i)} \left( \sum_k b_k \sin l_k x - \cos 2n\varphi \sum_k c_k \sin l_k x \right), \end{aligned} \quad (24)$$

де

$$\gamma_1^{(i)} = \frac{1}{2}(C^i)^2 l_m^2 n^2, \quad \gamma_2^{(i)} = B^i C^i l_m^2 n^2, \quad b_k = \frac{4k}{\pi(k^2 - 4m^2)}, \quad c_k = \frac{4}{n\pi}, \quad k = 1, 3, \dots$$

Розв’язок рівнянь (23) задаємо у вигляді

$$\begin{aligned} F_{i,2} &= \sum_k B_{k,0}^{(i)} \sin l_k x + \cos 2n\varphi \sum_k B_{k,2n}^{(i)} \sin l_k x; \\ \omega_{i,2} &= \sum_k C_{k,0}^{(i)} \sin l_k x + \cos 2n\varphi \sum_k C_{k,2n}^{(i)} \sin l_k x; \\ \theta_{i,2} &= \sum_k D_{k,0}^{(i)} \cos l_k x + \cos 2n\varphi \sum_k D_{k,2n}^{(i)} \cos l_k x; \\ \Psi_{i,2} &= \sum_k E_{k,2n}^{(i)} \sin l_k x \sin 2n\varphi. \end{aligned} \quad (25)$$

Отримавши розв’язок однорідної (14) і неоднорідної (23) систем рівнянь, можемо застосувати вираз (20) для визначення коефіцієнта  $b$ , за знаком і величиною якого можна судити про характер початкової закритичної поведінки оболонок, що розглядаються. Чисельник рівняння (19) представимо в такому вигляді:

$$\begin{aligned} B_i &= \sum_{i=1}^2 \int_0^L \int_0^{2\pi} \left[ \frac{R}{R_i^2} \left( \frac{\partial^2 F_{i,1}}{\partial \varphi^2} \frac{\partial \omega_{i,1}}{\partial x} - \frac{\partial^2 F_{i,1}}{\partial x \partial \varphi} \frac{\partial \omega_{i,1}}{\partial \varphi} \right) \frac{\partial \omega_{i,2}}{\partial x} + \frac{2}{R_i^2} \left( \frac{\partial^2 F_{i,1}}{\partial x^2} \frac{\partial \omega_{i,1}}{\partial \varphi} - \frac{\partial^2 F_{i,1}}{\partial x \partial \varphi} \frac{\partial \omega_{i,1}}{\partial x} \right) \frac{\partial \omega_{i,2}}{\partial \varphi} + \right. \\ &+ \left. \frac{1}{R_i^2} \left( \frac{\partial \omega_{i,1}}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 F_{i,2}}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{R_i^2} \left( \frac{\partial \omega_{i,1}}{\partial \varphi} \right)^2 \frac{\partial^2 F_{i,2}}{\partial x^2} - \frac{2}{R_i^2} \left( \frac{\partial \omega_{i,1}}{\partial \varphi} \frac{\partial \omega_{i,1}}{\partial x} \right) \frac{\partial^2 F_{i,2}}{\partial x \partial \varphi} \right] R_i dx d\varphi. \end{aligned} \quad (26)$$

Для знаменника в разі дії осьового  $\lambda a_t$  і  $\lambda a_q$  колового зусиль

$$A_i = -\lambda_c \sum_{i=1}^2 \int_0^L \int_0^{2\pi} \left[ a_t^i \left( \frac{\partial \omega_{i,1}}{\partial x} \right)^2 + a_q^i \left( \frac{\partial \omega_{i,1}}{R_i \partial \varphi} \right)^2 \right] R_i dx d\varphi. \quad (27)$$

Враховуючи ці позначення отримаємо

$$b = -\frac{(B_1 + B_2)}{(A_1 + A_2)}. \quad (28)$$

Функції  $w_{i,1}, w_{i,2}, F_{i,1}, F_{i,2}$ , що задані у вигляді тригонометричних функцій (21) і тригонометричних рядів (25), стають відомими після рішення однорідної системи алгебраїчних рівнянь (22) і неоднорідної системи (23). Підстановка цих функцій в вирази (27) і (28) з подальшим інтегруванням приводить до таких виразів для чисельника і знаменника дробу (18):

$$B = -2n^2 l_m^2 \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{1}{R_i^2} \sum_k \left[ 2 \left( 2 \frac{B^i}{C^i} C_{k,0} + B_{k,0} \right) \frac{k}{4m^2 - k^2} + \left( 2 \frac{B^i}{C^i} C_{k,2n} + B_{k,2n} \right) \frac{1}{k} \right] \right\};$$

$$A = \frac{\pi}{2} \sum_i (C^i)^2 \left( a_i^i l_m^3 + \frac{n^2}{R_i^2} a_i^i \right).$$

При відомому коефіцієнті  $b$  можна обчислити критичні навантаження  $\lambda_s$  оболонки з геометричними недосконаlostями у вигляді моди вигинання [10]

$$\left( 1 - \frac{\lambda_s}{\lambda_c} \right)^{\frac{3}{2}} = \frac{3}{2} \sqrt{-3b} \bar{\xi} \frac{\lambda_s}{\lambda_c},$$

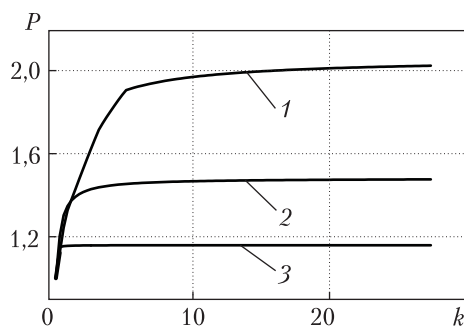
де  $\bar{\xi}$  — амплітуда початкового прогину.

**Результати розрахунку.** Використовуємо отримане рішення для аналізу особливостей вигинання тришарових оболонок, середній шар яких перешкоджає тільки зближенню або віддаленню зовнішніх шарів, але не чинить опору їх взаємному проковзуванню. Вважаємо, що несучі зовнішні шари виготовлені з армованого вуглецевими волокнами епоксидного сполучного. Об'ємний вміст волокон в композиті становить 0,6. Модуль пружності вуглецевого волокна  $E_a$  прийнятий рівним 420 ГПа, матриці —  $E = 3,5$  ГПа, коефіцієнти Пуассона відповідно рівні  $\nu_a = 0,21$  і  $\nu = 0,35$ . Отримані за формулами [8] механічні характеристики вуглепластика будуть такими:

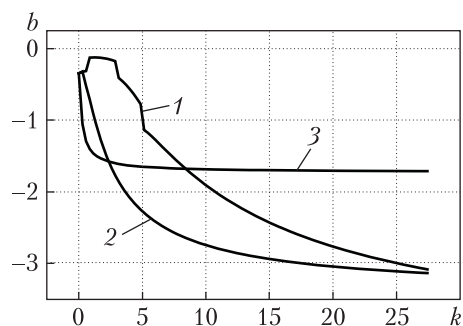
$$E_{11} = 253,42 \text{ ГПа}; E_{22} = 17,41 \text{ ГПа}; G_{12} = G_{13} = 5,04 \text{ ГПа};$$

$$G_{23} = 4,36 \text{ ГПа}; \nu_{12} = 0,257; \nu_{21} = 0,011.$$

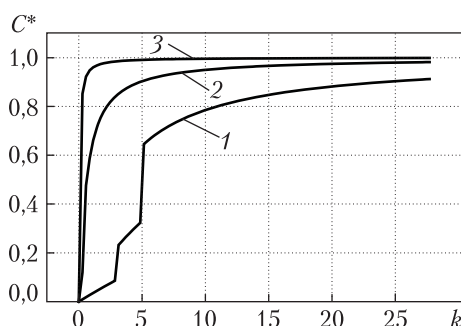
При аналізі критичних навантажень і особливостей закритичної поведінки тришарових оболонок будемо розглядати три варіанти, що відрізняються радіусом внутрішнього шару при заданій довжині  $L$ . Радіус зовнішнього шару  $R_1 = 100$  мм вважаємо незмінним. Внутрішній шар буде мати радіус  $R_2 = 75, 50$  чи  $25$  мм. Радіус середнього шару  $R_3$  в кожному варіанті визначається напівсумою  $(R_1 + R_2)/2$ . Товщини зовнішнього і внутрішнього шарів  $t = 5$  мм. Для середнього шару товщина  $t_3$  обчислюється відповідно до розглянутого варіанта:  $t_3 = R_1 - R_2 - t$ . Модуль пружності середнього шару  $E_3$  приймається рівним 20 МПа, жорсткість  $S_3 = E_3 / t_3$  зменшується обернено пропорційно товщині. Ця жорсткість при дослідженні її впливу на стійкість оболонки буде збільшуватися кратно цілому коефіцієнту  $k$ .



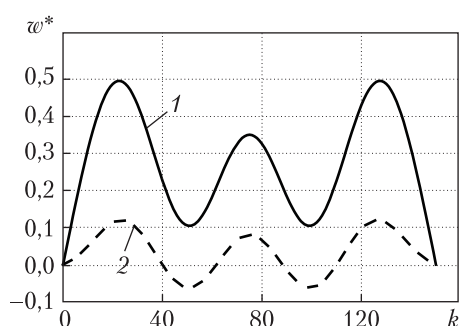
**Рис. 1.** Залежність критичних значень осевих зусиль  $T_{11,kr}$  від жорсткості  $S_3$



**Рис. 2.** Залежність коефіцієнта початкової закритичної поведінки  $b$  від жорсткості  $S_3$



**Рис. 3.** Відношення амплітуд мод вигинання внутрішньої оболонки до зовнішньої



**Рис. 4.** Форми вигинання зовнішньої (1) та внутрішньої (2) оболонок в околі критичної точки

Якщо між шарами зв'язку немає або він дуже незначний, то критичні осеві зусилля кожного шару будуть різними. Для оболонки з радіусом 100 мм  $T_{11,c} = 3604$  Н/мм, а для оболонки з радіусами 75; 50 та 25 мм ці зусилля будуть рівні відповідно 4927; 7642 та 13650 Н/мм.

За наявності між шарами вуглепластика лінійних пружин або радіально армованого легкого матеріалу нормальні переміщення  $w_1$  і  $w_2$  взаємопов'язані. Врахування цього чинника в розробленій моделі дозволяє виявити ряд особливостей, супутніх втраті стійкості оболонок, що розглядаються, включаючи біфуркацію рівноважного стану і початкову закритичну поведінку. На рис.1 наведені криві, що ілюструють залежність критичних значень осевих зусиль  $T_{11,kr}$  від жорсткості  $S_3$ . На цьому рисунку по осі абсцис відкладені значення коефіцієнта  $k$ , кратно якому збільшується трансверсальна жорсткість заповнювача: по осі ординат – значення  $P = T_{11,kr} / T_{11,c}$ , де  $T_{11,c}$  – критичне зусилля одношарової оболонки з радіусом  $R_1$ . Крива 1 отримана для варіанта з  $R_2 = 25$ мм, крива 2 – при  $R_2 = 50$  мм, крива 3 – при  $R_2 = 75$  мм. Кожна з цих кривих має дві характерні ділянки. Перша ділянка відповідає значному впливу жорсткості  $S_3$  на критичні зусилля, хоча максимальна ордината для кожного варіанта тришарової оболонки різна. На кривій 1 ця ордината незначно більше 1,9; на кривій 2 – 1,5; на кривій 3 – 1,2. Друга ділянка кожної кривої майже паралельна

осі абсцис. Залежності коефіцієнта  $b$  від геометричних параметрів шарів і трансверсальної жорсткості  $S_3$  у вигляді кривих показані на рис. 2. Номерами 1, 2 та 3 позначені графіки для тих же оболонок, що і на рис. 1. Для всіх розглянутих оболонок коефіцієнт  $b$  — негативний, що говорить про те, що критичний стан цих оболонок буде нестійким.

Уявлення про те, як деформується внутрішній шар оболонки при біфуркації дає рис. 3. Тут  $C^* = C_2 / C_1$ , де  $C_i$  — амплітуди хвиль зовнішніх шарів при втраті стійкості. З постановки задачі виходить, що хвилеутворення обох несучих оболонок однакове за формою, але може відрізнятись за амплітудами. Якщо амплітуда моди вигинання зовнішньої оболонки дорівнює одиниці, то амплітуда моди внутрішньої оболонки в залежності від жорсткості  $S_3$  для варіантів, що розглядаються, буде змінюватися так, як показано на рис. 3. Амплітуда зростає від 0 до 1, але кожного разу — з різною швидкістю. З цього випливає, що при деякій жорсткості середнього шару рознесені вуглепластикові шари, незважаючи на відмінність в їх радіусах, будуть втрачати стійкість по однаковій формі. Критичне зусилля для тришарової оболонки  $T_{11,кр} > T_{11,c}$  для шару з радіусом  $R_1$  і  $T_{11,кр} < T_{11,c}$  для шару з радіусом  $R_2$ . У прийнятій розрахунковій моделі при нульовій жорсткості середнього шару критичне зусилля  $T_{11,кр} = T_{11,c}$  зовнішнього шару.

На рис. 4 наведені графіки, що ілюструють форму, яку будуть мати твірні зовнішнього і внутрішнього циліндрів в околі критичної точки (тобто в початковому закритичному стані). Крива 1 на цих рисунках відноситься до зовнішньої оболонки, крива 2 — до внутрішньої. На рис. 4 наведені графіки для  $S_3 = 1,704$  Н/мм. Зі збільшенням трансверсальної жорсткості форми вигинання шарів, як при біфуркації, так і в початковому закритичному стані зближуються. Такий характер втрати стійкості тришарових оболонок спостерігається в тому випадку, якщо у вихідній розрахунковій моделі використовується гіпотеза ламаної лінії [1].

Таким чином, нами розглянуто стійкість нового типу тришарових оболонок з композитів з трансверсально пружним легким заповнювачем. Його відмінною рисою є те, що він має незначну зсувну жорсткість, якою можна знехтувати. При цьому виникає можливість вивчити вплив поперечного обтиснення на критичні навантаження незалежно від інших механічних властивостей заповнювача.

Розроблено процедуру розв'язання задачі стійкості і закритичної поведінки тришарової оболонки з використанням асимптотичного методу Койтера—Будяньського.

Проведено розрахунок на стійкість оболонок, що складаються з двох коаксіальних взаємодіючих вуглепластикових циліндрів різного радіуса при осьовому стиску. Показано, що втрата стійкості такої конструкції відбувається при зусиллі, більшому за критичне зусилля окремо взятої зовнішньої оболонки і меншому — від внутрішньої. Починаючи з деякого значення трансверсальної жорсткості заповнювача, критичне навантаження на оболонку не росте, не дивлячись на зростання жорсткості. Чутливості до недосконалостей також стабілізуються, але не так різко, як критичні навантаження. Відзначимо, що умови застосування асимптотичного методу в розглянутій задачі виконуються.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Григолюк Э.И., Чулков П.П. Устойчивость и колебания трехслойных оболочек. Москва: Машиностроение, 1973. 172 с.
2. Hunt G.W., Wadee M.A. Localization and Mode Interaction in Sandwich Structure. *Prec. Math., Phys. Eng. Sci.* 1998. **454**, № 1972. P. 1197–1216.
3. Vinson J.R. Sandwich Structures: Past, Present, Future. Sandwich Structures 7: Advancing in Sandwich Structures and Materials: Proc. of the 7 th inter. Conf. on Sandwich Structures. Aalborg Univ., Denmark, 2005. P. 29–31.
4. Wadee M.A., Yiatros S., Theofanous M. Comparative Studies of Localized Bending of Sandwich Struts with Different Core Bending Models. *Int. J. Non-linear Mech.* 2010. **45**. P. 111–120.
5. Yuan C., Bergsma O., Koussios S., Zu L., Beukers A. Optimization of Sandwich Composites Fuselages under Flight Loads. *Appl. Compos. Mater.* 2012. **19**, № 1. P. 47–64.
6. Wang C.M., Ma Y.Q., Zhang Y., Ang K. Buckling of double-walled carbon nanotubes modeled by solid shell elements. *J. Appl. Phys.* 2006. **99**(11). P. 114317.
7. Семенюк Н.П. О начальном закритическом поведении стеклопластиковых цилиндрических оболочек с наполнителем при осевом сжатии. *Прикл. механика*. 1988. **24**, № 5. С. 54–60.
8. Ванин Г. А., Семенюк Н.П. Устойчивость оболочек из композиционных материалов с несовершенствами. Киев: Наук. думка, 1987. 200с.
9. Пастернак П. Л. Основы метода расчета фундаментов на упругом основании при помощи двух коэффициентов постели. Москва: Стройиздат, 1954. 56 с.
10. Koiter W.T. Elastic stability and post-buckling behavior. Proc. Symp. Nonlinear Problems. Madison: Univ. of Wisconsin Press. 1963. P. 257–275.
11. Ямаки Н. Закритическое поведение и чувствительность к несовершенствам круглой цилиндрической оболочки, подверженной сжатию. Теоретическая и прикладная механика: Тр. XIV Международ. конгр. IUTAM. Москва: Мир, 1979. С. 715–750.
12. Budsonsky B. Theory of Buckling and Post-buckling Behavior of Elastic Structures. *Adv. Appl. Mech.* 1974. **14**. P. 2–65.

Надійшло до редакції 21.02.2019

REFERENCES

1. Grigolyuk, E. I. & Chulkov, P. P. (1973). Stability and vibrations of sandwich shells. Moscow: Maschinostroenie (in Russian).
2. Hunt, G. W. & Wadee, M. A. (1998) Localization and Mode Interaction in Sandwich Structures. *Prec. Math., Phys. Eng. Sci.*, 454, No. 1972, pp. 1197-1216.
3. Vinson, J. R. (2005). Sandwich Structures: Past, Present, Future /Sandwich Structures 7: Advancing in Sandwich Structures and Materials: Proc. of the 7 th inter. Conf. on Sandwich Structures. Aalborg Univ., Denmark. P. 29-31.
4. Wadee, M A., Yiatros, S. & Theofanous, M. (2010). Comparative Studies of Localized Bending of Sandwich Struts with Different Core Bending Models. *Int. J. Non-linear Mech.*, 45, pp. 111-120.
5. Yuan, C., Bergsma, O., Koussios, S., Zu, L. & Beukers, A. (2012). Optimization of Sandwich Composites Fuselages under Flight Loads. *Appl. Compos. Mater.*, 19, No. 1, pp. 47-64.
6. Wang, C. M., Ma, Y. Q., Zhang, Y. & Ang, K. (2006). Buckling of double-walled carbon nanotubes modeled by solid shell elements. *J. Appl. Phys.*, 99(11), pp. 114317.
7. Semenyuk, N. P. (1998). Initial Supercritical Behavior of Fiberglasses Cylindrical Shells with Filler under Axial Compression. *Int. Appl. Mech.*, 24, No. 5, pp. 478-484.
8. Vanin, G. A. & Semenyuk, N. P. (1987). Stability of shells made of composite materials with imperfections. Kiev: Naukova Dumka (in Russian).
9. Pasternak, P. L (1954). Fundamentals of the method for calculation of base on the elastic foundation using two stiffness coefficients. Moscow: Stroiizdat (in Russian).
10. Koiter, W. T. (1963). Elastic stability and post-buckling behavior. Proc. Symp. Nonlinear Problems. Madison: Univ. of Wisconsin Press. P. 257-275.

11. Yamaki, N. (1979). Post-buckling behavior and sensitivity to the imperfections of a circular cylindrical shell subjected to compression. Theoretical and applied mechanics: Proc. XIV int. congr. IUTAM. Moscow: Mir. P. 715-750 (in Russian).
12. Budiansky, B. (1974). Theory of Buckling and Post-buckling Behavior of Elastic Structures. Adv. Appl. Mech., 14, pp. 2-65.

Received 21.02.2019

Н.П. Семенюк<sup>1</sup>, В.М. Трач<sup>2</sup>, Н.Б. Жукова<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Інститут механіки ім. С.П. Тимошенка НАН України, Київ

<sup>2</sup> Национальный университет водного хозяйства и природопользования, Ровно

E-mail: zhukova\_n@ukr.net, trach-vm@ukr.net

#### ДЕФОРМИРОВАНИЕ ТРЕХСЛОЙНЫХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ОБОЛОЧЕК С ТРАНСВЕРСАЛЬНО УПРУГИМ ЗАПОЛНИТЕЛЕМ В ОКРЕСТНОСТИ КРИТИЧЕСКОГО СЖАТИЯ

С использованием асимптотического метода Койтера—Будянского разработана процедура решения задачи об устойчивости и закритическом поведении трехслойной оболочки с легким заполнителем, обладающим упругостью только в трансверсальном направлении. Разрешающая система нелинейных уравнений выведена с учетом дискретности структуры, что позволяет рассматривать общие и локальные варианты форм потери устойчивости. Выполнен расчет конструкций, состоящих из двух цилиндрических углепластиковых оболочек, взаимодействующих посредством пружинного заполнителя.

**Ключевые слова:** трехслойные оболочки, устойчивость, трансверсально упругий заполнитель, асимптотический метод, закритическое поведение.

N.P. Semenyuk<sup>1</sup>, V.M. Trach<sup>2</sup>, N.B. Zhukova<sup>1</sup>

<sup>1</sup> S.P.Timoshenko Institute of Mechanics of NAS of Ukraine, Kiev

<sup>2</sup> National University of Water and Environmental Engineering, Rivne

E-mail: zhukova\_n@ukr.net, trach-vm@ukr.net

#### DEFORMATION OF THREE-LAYER CYLINDRICAL SHELLS WITH TRANSVERSALLY ELASTIC CORE IN A VICINITY OF THE CRITICAL COMPRESSION

Using the asymptotic Koiter—Budyansky method, a procedure is developed for solving the problem of stability and the postbuckling behavior of a sandwich shell with a lightweight core, which has elasticity only in the transverse direction. The resolving system of nonlinear equations is derived, by taking the discreteness of the structure into account, which allows us to consider general and local variants of the forms of buckling. The calculation of the structures consisting of two cylindrical carbon-fiber shells interacting by means of a spring core was performed.

**Keywords:** sandwich shells, stability, transversally elastic filler, asymptotic method, postbuckling behavior.



---

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.05.056>

УДК 539.3

**Л.П. Хорошун, О.И. Левчук**

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

E-mail: lkhoroshun@ukr.net, 2013levchuk@gmail.com

## **Эффективные упругие свойства слоистых композитов при несовершенной адгезии**

*Представлено членом-корреспондентом НАН Украины Л.П. Хорошун*

*Рассмотрена задача об эффективных упругих свойствах слоистого композитного материала стохастической структуры при несовершенной адгезии, которая моделируется межфазным слоем с дефектами в виде микропор. На поверхностях раздела межфазного слоя со слоями наполнителя и матрицы выполняются условия совершенного контакта в виде непрерывности перемещений и поверхностных напряжений. Межфазные слои рассматриваются как третий компонент, состоящий из пористых приповерхностных слоев двух компонентов и аппретирующих покрытий. При решении задачи использованы стохастические дифференциальные уравнения упругости в перемещениях для многокомпонентного КМ слоистой структуры с изотропными и анизотропными компонентами. На основе полученного решения исследованы эффективные свойства трехкомпонентного КМ слоистой структуры. Построены кривые зависимостей эффективных упругих постоянных слоистого материала с изотропными компонентами от объемного содержания наполнителя и пористости межфазного слоя.*

**Ключевые слова:** несовершенная адгезия, эффективные упругие свойства, слоистый композит, стохастические уравнения, условия несовершенного контакта, пористый межфазный слой.

В современной технике широко применяются КМ, состоящие из матрицы, армированной наполнителем с высокими характеристиками жесткости и прочности. В ряде работ [1–5] идеальное сцепление матрицы и элементов наполнителя описывается непрерывностью перемещений и поверхностных напряжений при переходе через границу раздела компонентов. В реальных композитных материалах условия идеальной адгезии не соблюдаются ввиду наличия переходной зоны, нанесения аппретов для усиления связи между компонентами, а также наличием дефектов в виде микротрещин и микропор, ослабляющих адгезию. Это обусловило появление различных вариантов формулировки моделей несовершенного контакта матрицы и включений [6–12].

Наиболее адекватной представляется модель контакта матрицы и включения, базирующаяся на представлении, что между матрицей и включением существует межфазный материальный слой, свойства которого отличаются от свойств матрицы и включения [6, 13]. При этом на поверхностях раздела межфазного слоя с матрицей и включением выполняются

© Л.П. Хорошун, О.И. Левчук, 2019



условия совершенного контакта в виде непрерывности перемещений и поверхностных напряжений, что дает основание рассматривать межфазный слой как третью фазу.

В настоящей работе рассматривается задача об эффективных упругих свойствах слоистого композитного материала стохастической структуры, где несовершенная адгезия моделируется межфазным слоем с дефектами в виде микропор.

Упругие свойства межфазного слоя отличаются от свойств слоев наполнителя и матричного материала. На поверхностях раздела межфазного слоя со слоями наполнителя и матрицы выполняются условия совершенного контакта в виде непрерывности перемещений и поверхностных напряжений. Межфазные слои рассматриваются как третий компонент, состоящий из пористых приповерхностных слоев двух компонентов и аппретирующих покрытий с дефектами в виде микропор.

**Основные уравнения.** Будем исходить из представления о трехкомпонентном композитном материале слоистой структуры, состоящем из чередующихся слоев наполнителя, матричного материала и находящихся между ними межфазных слоев. Сцепление между межфазным слоем и контактирующими с ним слоями наполнителя и матрицы принимаем совершенным, обеспечивающим на границе непрерывность перемещений и поверхностных напряжений. В этом случае физико-механические характеристики будут функциями одной координаты.

Рассмотрим макрообъем слоистого материала, находящийся в условиях однородных макродеформаций и макронапряжений. Напряженно-деформированное состояние в микроточке описывается уравнениями равновесия

$$\sigma_{ij,j} = 0, \quad (1)$$

соотношениями упругости

$$\sigma_{ij} = \lambda_{ijmn} \varepsilon_{mn} \quad (2)$$

и Коши

$$\varepsilon_{ij} = u_{(i,j)} \equiv \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}). \quad (3)$$

Пусть ось  $x_3$  направлена по нормали к слоям. Тогда упругие характеристики  $\lambda_{ijmn}$  будут случайными функциями лишь координаты  $x_3$ . Вследствие однородности макронапряжений  $\langle \sigma_{ij} \rangle$  и макродеформаций  $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$  напряжения  $\sigma_{ij}$ , деформации  $\varepsilon_{ij}$  и флуктуации перемещений  $u_i^0 = u_i - \langle \varepsilon_{ij} \rangle x_j$  также будут функциями одной координаты  $x_3$ . В этом случае уравнения равновесия (1) упрощаются

$$\sigma_{i3,3} = 0, \quad (4)$$

откуда находим

$$\sigma_{i3} = A_i, \quad A_i = \text{const}. \quad (5)$$

Выражения для деформаций согласно (3) имеют вид

$$\varepsilon_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle + \frac{1}{2}(u_{i,3}^0 \delta_{j3} + u_{j,3}^0 \delta_{i3}). \quad (6)$$

Подставляя (2), (6) в интегралы уравнений равновесия (5), получаем алгебраические уравнения относительно производных от флуктуаций перемещений

$$\lambda_{i3m3} u_{m,3}^0 = A_i - \lambda_{i3mn} \langle \varepsilon_{mn} \rangle. \quad (7)$$

Решения их будут следующими:

$$u_{m,3}^0 = \lambda_{i3m3}^{-1} (A_m - \lambda_{m3pq} \langle \varepsilon_{pq} \rangle). \quad (8)$$

Осредняя соотношения (8) и учитывая, что математические ожидания от флуктуаций равны нулю, получаем

$$\langle \lambda_{i3k3}^{-1} \rangle A_k - \langle \lambda_{i3k3}^{-1} \lambda_{m3pq} \rangle \langle \varepsilon_{pq} \rangle = 0. \quad (9)$$

Отсюда находим постоянные интегрирования

$$A_i = \langle \lambda_{i3m3}^{-1} \rangle^{-1} \langle \lambda_{m3n3}^{-1} \lambda_{n3pq} \rangle \langle \varepsilon_{pq} \rangle, \quad (10)$$

а из (8), (10) находим флуктуации производных перемещений

$$u_{i,3}^0 = \lambda_{i3k3}^{-1} (\langle \lambda_{k3m3}^{-1} \rangle^{-1} \langle \lambda_{m3n3}^{-1} \lambda_{n3pq} \rangle - \lambda_{k3pq}) \langle \varepsilon_{pq} \rangle. \quad (11)$$

Подставляя (11) в (6), получаем выражения микродеформаций через макродеформации

$$\varepsilon_{ij} = \left[ \delta_{ip} \delta_{jq} + \frac{1}{2} (\lambda_{i3m3}^{-1} \delta_{j3} + \lambda_{j3m3}^{-1} \delta_{i3}) (\langle \lambda_{m3n3}^{-1} \rangle^{-1} \langle \lambda_{n3k3}^{-1} \lambda_{k3pq} \rangle - \lambda_{m3pq}) \right] \langle \varepsilon_{pq} \rangle. \quad (12)$$

Микронапряжения находим подстановкой (12) в (2)

$$\sigma_{ij} = [\lambda_{ijpq} + \lambda_{ijm3} \lambda_{m3n3}^{-1} (\langle \lambda_{n3k3}^{-1} \rangle^{-1} \langle \lambda_{k3s3}^{-1} \lambda_{s3pq} \rangle - \lambda_{n3pq})] \langle \varepsilon_{pq} \rangle. \quad (13)$$

Осредняя выражение (13), получаем зависимости между макронапряжениями и макродеформациями:

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \lambda_{ijpq}^* \langle \varepsilon_{pq} \rangle, \quad (14)$$

где эффективные упругие постоянные определяются формулами

$$\lambda_{ijpq}^* = \langle \lambda_{ijpq} \rangle + \langle \lambda_{ijm3} \lambda_{m3n3}^{-1} \rangle \langle \lambda_{n3k3}^{-1} \rangle^{-1} \langle \lambda_{k3s3}^{-1} \lambda_{s3pq} \rangle - \langle \lambda_{ijm3} \lambda_{m3n3}^{-1} \lambda_{n3pq} \rangle. \quad (15)$$

Выражения содержат только одноточечные моменты относительно упругих характеристик материала, поэтому достаточно задать одноточечную плотность упругих характеристик. Для  $N$ -компонентного материала одноточечная плотность имеет вид

$$f(\lambda_{ijmn}) = \sum_{k=1}^N c_k \delta(\lambda_{ijmn} - \lambda_{ijmn}^k), \quad (16)$$

где  $c_k, \lambda_{ijmn}^k$  — соответственно объемное содержание и тензор модулей упругости;  $k$  — компонента. Отсюда для  $N$ -компонентного слоистого композитного материала находим

$$\langle \varphi(\lambda_{ijmn}) \rangle = \sum_{k=1}^N c_k \varphi(\lambda_{ijmn}^k). \quad (17)$$

Формулы (15)–(17) позволяют вычислить эффективные постоянные слоистого композита с произвольной симметрией материала слоев. Однако практическое их использование связано с громоздкими операциями обращения, осреднения и свертывания. Так как в реальных материалах слои обладают определенной симметрией, то целесообразно вычислять эффективные постоянные с учетом симметрии слоев.

**Изотропные слои.** Если слои изотропны, то упругие характеристики имеют вид

$$\lambda_{ijmn} = \lambda \delta_{ij} \delta_{mn} + \mu (\delta_{im} \delta_{jn} + \delta_{in} \delta_{jm}), \quad (18)$$

где  $\lambda, \mu$  – характеристики Ламе.

Подставляя (18) в (7), находим

$$u_{i,3}^0 = \frac{1}{\mu} A_i - 2 \langle \varepsilon_{i3} \rangle, \quad u_{3,3}^0 = \frac{1}{\lambda + 2\mu} A_3 - \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \langle \varepsilon_{kk} \rangle - \langle \varepsilon_{33} \rangle, \quad (i, k = 1, 2). \quad (19)$$

Осредняя (19), определяем постоянные интегрирования

$$A_i = 2 \left\langle \frac{1}{\mu} \right\rangle \langle \varepsilon_{i3} \rangle, \quad A_3 = \left\langle \frac{1}{\lambda + 2\mu} \right\rangle^{-1} \left[ \left\langle \frac{1}{\lambda + 2\mu} \right\rangle \langle \varepsilon_{kk} \rangle + \langle \varepsilon_{33} \rangle \right] \quad (i, k = 1, 2). \quad (20)$$

На основе (6), (19), (20) находим микродеформации

$$\varepsilon_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle, \quad \varepsilon_{i3} = \frac{1}{\mu} \left\langle \frac{1}{\mu} \right\rangle^{-1} \langle \varepsilon_{i3} \rangle, \quad (21)$$

$$\varepsilon_{33} = \frac{1}{\lambda + 2\mu} \left\langle \frac{1}{\lambda + 2\mu} \right\rangle^{-1} \left[ \left\langle \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \right\rangle - \lambda \left\langle \frac{1}{\lambda + 2\mu} \right\rangle \langle \varepsilon_{kk} \rangle + \varepsilon_{33} \right] \quad (i, k = 1, 2).$$

Подставляя (18), (21) в (2), получаем выражения микронапряжений

$$\sigma_{ij} = 2\mu \langle \varepsilon_{ij} \rangle + \frac{1}{\lambda + 2\mu} \left\langle \frac{1}{\lambda + 2\mu} \right\rangle^{-1} \left( \left\langle \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \right\rangle + \right.$$

$$\left. + 2\mu \left\langle \frac{1}{\lambda + 2\mu} \right\rangle \right) \langle \varepsilon_{kk} \rangle \delta_{ij} + \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \left\langle \frac{1}{\lambda + 2\mu} \right\rangle \langle \varepsilon_{33} \rangle \delta_{ij}, \quad (22)$$

$$\sigma_{i3} = 2 \left\langle \frac{1}{\mu} \right\rangle^{-1} \langle \varepsilon_{i3} \rangle, \quad \sigma_{33} = \left\langle \frac{1}{\lambda + 2\mu} \right\rangle^{-1} \left( \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \langle \varepsilon_{kk} \rangle + \langle \varepsilon_{33} \rangle \right) \quad (i, k = 1, 2).$$

Осредняя (22), находим зависимости между макронапряжениями и макродеформациями

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = (\lambda_{11}^* - \lambda_{12}^*) \langle \varepsilon_{ij} \rangle + (\lambda_{12}^* \langle \varepsilon_{kk} \rangle + \lambda_{13}^* \langle \varepsilon_{33} \rangle) \delta_{ij}, \quad (23)$$

$$\langle \sigma_{33} \rangle = \lambda_{13}^* \langle \varepsilon_{kk} \rangle + \lambda_{33}^* \langle \varepsilon_{33} \rangle, \quad \langle \sigma_{i3} \rangle = 2\lambda_{44}^* \langle \varepsilon_{i3} \rangle \quad (i, k = 1, 2),$$

где эффективные упругие постоянные определяются формулами

$$\lambda_{11}^* = \left\langle \frac{1}{\lambda + 2\mu} \right\rangle^{-1} \left\langle \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \right\rangle^2 + 4 \left\langle \frac{\mu(\lambda + \mu)}{\lambda + 2\mu} \right\rangle,$$

$$\lambda_{12}^* = \left\langle \frac{1}{\lambda + 2\mu} \right\rangle^{-1} \left\langle \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \right\rangle^2 + 2 \left\langle \frac{\lambda\mu}{\lambda + 2\mu} \right\rangle, \quad (24)$$

$$\lambda_{13}^* = \left\langle \frac{1}{\lambda + 2\mu} \right\rangle^{-1} \left\langle \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \right\rangle, \quad \lambda_{33}^* = \left\langle \frac{1}{\lambda + 2\mu} \right\rangle^{-1}, \quad \lambda_{44}^* = \left\langle \frac{1}{\mu} \right\rangle^{-1}.$$

Если обозначить объемные содержания и характеристики Ламе наполнителя, матричного материала и межфазных слоев соответственно  $c_1, \lambda_1, \mu_1, c_2, \lambda_2, \mu_2, c_3, \lambda_3, \mu_3$ , то эффективные упругие постоянные (24) слоистого КМ будут определяться формулами

$$\begin{aligned} \lambda_{11}^* &= \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v}{\lambda_v + 2\mu_v} \right)^{-1} \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v \lambda_v}{\lambda_v + 2\mu_v} \right)^2 + 4 \left[ \sum_{v=1}^3 \frac{c_v \mu_v (\lambda_v + \mu_v)}{\lambda_v + 2\mu_v} \right], \\ \lambda_{12}^* &= \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v}{\lambda_v + 2\mu_v} \right)^{-1} \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v \lambda_v}{\lambda_v + 2\mu_v} \right)^2 + 2 \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v \lambda_v \mu_v}{\lambda_v + 2\mu_v} \right), \\ \lambda_{13}^* &= \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v}{\lambda_v + 2\mu_v} \right)^{-1} \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v \lambda_v}{\lambda_v + 2\mu_v} \right), \quad \lambda_{33}^* = \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v}{\lambda_v + 2\mu_v} \right)^{-1}, \quad \lambda_{44}^* = \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v}{\mu_v} \right)^{-1}, \\ k^* &= \frac{1}{2}(\lambda_{11}^* + \lambda_{12}^*), \quad m^* = \frac{1}{2}(\lambda_{11}^* - \lambda_{12}^*). \end{aligned} \tag{25}$$

**Ортотропные слои.** Рассмотрим слоистый композит, составленный из ортотропных слоев, плоскости симметрии которых совпадают с координатными плоскостями. Зависимости между напряжениями и деформациями в микроточке запишем в виде

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= \lambda_{11}\varepsilon_{11} + \lambda_{12}\varepsilon_{22} + \lambda_{13}\varepsilon_{33}, \quad \sigma_{23} = 2\lambda_{44}\varepsilon_{23}, \\ \sigma_{22} &= \lambda_{12}\varepsilon_{11} + \lambda_{22}\varepsilon_{22} + \lambda_{23}\varepsilon_{33}, \quad \sigma_{13} = 2\lambda_{55}\varepsilon_{13}, \\ \sigma_{33} &= \lambda_{13}\varepsilon_{11} + \lambda_{23}\varepsilon_{22} + \lambda_{33}\varepsilon_{33}, \quad \sigma_{12} = 2\lambda_{66}\varepsilon_{12}. \end{aligned} \tag{26}$$

Согласно (5), (6) имеем

$$\begin{aligned} \lambda_{55}(2\langle \varepsilon_{13} \rangle + u_{1,3}^0) &= C_1, \quad \lambda_{44}(2\langle \varepsilon_{23} \rangle + u_{2,3}^0) = C_2, \\ \lambda_{13}\langle \varepsilon_{11} \rangle + \lambda_{23}\langle \varepsilon_{22} \rangle + \lambda_{33}(\langle \varepsilon_{33} \rangle + u_{3,3}^0) &= C_3, \end{aligned} \tag{27}$$

где  $C_1, C_2, C_3$  — постоянные.

Решая (27) относительно производных от флуктуаций перемещений и проводя осреднение, находим

$$\begin{aligned} C_1 &= 2\langle \lambda_{55}^{-1} \rangle^{-1} \langle \varepsilon_{13} \rangle, \quad C_2 = 2\langle \lambda_{44}^{-1} \rangle^{-1} \langle \varepsilon_{23} \rangle, \\ C_3 &= \langle \lambda_{33}^{-1} \rangle^{-1} (\langle \lambda_{13} \lambda_{33}^{-1} \rangle \langle \varepsilon_{11} \rangle + \langle \lambda_{23} \lambda_{33}^{-1} \rangle \langle \varepsilon_{22} \rangle + \langle \varepsilon_{33} \rangle). \end{aligned} \tag{28}$$

На основе соотношений (6), (26) — (28) получим выражения микронапряжений через макродеформации:

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= [\lambda_{11} + \lambda_{13} \lambda_{33}^{-1} (\langle \lambda_{33}^{-1} \rangle^{-1} \langle \lambda_{13} \lambda_{33}^{-1} \rangle - \lambda_{13})] \langle \varepsilon_{11} \rangle + \\ &+ [\lambda_{12} + \lambda_{13} \lambda_{33}^{-1} (\langle \lambda_{33}^{-1} \rangle^{-1} \langle \lambda_{23} \lambda_{33}^{-1} \rangle - \lambda_{23})] \langle \varepsilon_{22} \rangle + \lambda_{13} \lambda_{33}^{-1} \langle \lambda_{33}^{-1} \rangle^{-1} \langle \varepsilon_{33} \rangle, \\ \sigma_{22} &= [\lambda_{12} + \lambda_{23} \lambda_{33}^{-1} (\langle \lambda_{33}^{-1} \rangle^{-1} \langle \lambda_{13} \lambda_{33}^{-1} \rangle - \lambda_{13})] \langle \varepsilon_{11} \rangle + \\ &+ [\lambda_{22} + \lambda_{23} \lambda_{33}^{-1} (\langle \lambda_{33}^{-1} \rangle^{-1} \langle \lambda_{23} \lambda_{33}^{-1} \rangle - \lambda_{23})] \langle \varepsilon_{22} \rangle + \lambda_{23} \lambda_{33}^{-1} \langle \lambda_{33}^{-1} \rangle^{-1} \langle \varepsilon_{33} \rangle, \end{aligned} \tag{29}$$

$$\begin{aligned}\sigma_{33} &= \langle \lambda_{33}^{-1} \rangle^{-1} (\langle \lambda_{13} \lambda_{33}^{-1} \rangle \langle \varepsilon_{11} \rangle + \langle \lambda_{23} \lambda_{33}^{-1} \rangle \langle \varepsilon_{22} \rangle + \langle \varepsilon_{33} \rangle), \\ \sigma_{23} &= 2 \langle \lambda_{44}^{-1} \rangle^{-1} \langle \varepsilon_{23} \rangle, \quad \sigma_{13} = 2 \langle \lambda_{55}^{-1} \rangle^{-1} \langle \varepsilon_{13} \rangle, \quad \sigma_{12} = 2 \lambda_{66} \langle \varepsilon_{12} \rangle.\end{aligned}$$

Осредняя соотношения (29), получаем зависимости между макронапряжениями и макродеформациями

$$\begin{aligned}\langle \sigma_{11} \rangle &= \lambda_{11}^* \langle \varepsilon_{11} \rangle + \lambda_{12}^* \langle \varepsilon_{22} \rangle + \lambda_{13}^* \langle \varepsilon_{33} \rangle, \quad \langle \sigma_{23} \rangle = 2 \lambda_{44}^* \langle \varepsilon_{23} \rangle, \\ \langle \sigma_{22} \rangle &= \lambda_{12}^* \langle \varepsilon_{11} \rangle + \lambda_{22}^* \langle \varepsilon_{22} \rangle + \lambda_{23}^* \langle \varepsilon_{33} \rangle, \quad \langle \sigma_{13} \rangle = 2 \lambda_{55}^* \langle \varepsilon_{13} \rangle, \\ \langle \sigma_{33} \rangle &= \lambda_{13}^* \langle \varepsilon_{11} \rangle + \lambda_{23}^* \langle \varepsilon_{22} \rangle + \lambda_{33}^* \langle \varepsilon_{33} \rangle, \quad \langle \sigma_{12} \rangle = 2 \lambda_{66}^* \langle \varepsilon_{12} \rangle,\end{aligned}\tag{30}$$

где эффективные постоянные определяются формулами

$$\begin{aligned}\lambda_{11}^* &= \langle \lambda_{11} \rangle + \langle \lambda_{13} \lambda_{33}^{-1} \rangle^2 \langle \lambda_{33}^{-1} \rangle^{-1} - \langle \lambda_{13}^2 \lambda_{33}^{-1} \rangle, \\ \lambda_{12}^* &= \langle \lambda_{12} \rangle + \langle \lambda_{13} \lambda_{33}^{-1} \rangle \langle \lambda_{23} \lambda_{33}^{-1} \rangle \langle \lambda_{33}^{-1} \rangle^{-1} - \langle \lambda_{13} \lambda_{23} \lambda_{33}^{-1} \rangle, \\ \lambda_{13}^* &= \langle \lambda_{13} \lambda_{33}^{-1} \rangle \langle \lambda_{33}^{-1} \rangle^{-1}, \quad \lambda_{22}^* = \langle \lambda_{22} \rangle + \langle \lambda_{23} \lambda_{33}^{-1} \rangle^2 \langle \lambda_{33}^{-1} \rangle^{-1} - \langle \lambda_{23}^2 \lambda_{33}^{-1} \rangle, \\ \lambda_{23}^* &= \langle \lambda_{23} \lambda_{33}^{-1} \rangle \langle \lambda_{33}^{-1} \rangle^{-1}, \quad \lambda_{33}^* = \langle \lambda_{33}^{-1} \rangle^{-1}, \quad \lambda_{44}^* = \langle \lambda_{44}^{-1} \rangle^{-1}, \quad \lambda_{55}^* = \langle \lambda_{55}^{-1} \rangle^{-1}, \quad \lambda_{66}^* = \langle \lambda_{66} \rangle.\end{aligned}\tag{31}$$

Если слои композита трансверсально изотропны с плоскостью изотропии  $x_1x_2$ , то в зависимостях (26), (30), (31) следует положить

$$\begin{aligned}\lambda_{11} &= \lambda_{22}, \quad \lambda_{13} = \lambda_{23}, \quad \lambda_{44} = \lambda_{55}, \quad \lambda_{11} - \lambda_{22} = 2 \lambda_{66}, \\ \lambda_{11}^* &= \lambda_{22}^*, \quad \lambda_{13}^* = \lambda_{23}^*, \quad \lambda_{44}^* = \lambda_{55}^*, \quad \lambda_{11}^* - \lambda_{22}^* = 2 \lambda_{66}^*,\end{aligned}\tag{32}$$

т.е. в макрообъеме материал также трансверсально изотропен.

Если обозначить объемные содержания и модули упругости наполнителя, матричного материала и межфазных слоев соответственно  $c_v, \lambda_{11v}, \lambda_{12v}, \lambda_{13v}, \lambda_{22v}, \lambda_{23v}, \lambda_{33v}, \lambda_{44v}, \lambda_{55v}, \lambda_{66v}$  ( $v = 1, 2, 3$ ), то эффективные упругие модули упругости (31) слоистого КМ будут определяться формулами

$$\begin{aligned}\lambda_{11}^* &= \sum_{v=1}^3 c_v \lambda_{11v} + \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v \lambda_{13v}}{\lambda_{33v}} \right)^2 \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v}{\lambda_{33v}} \right)^{-1} - \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v \lambda_{13v}^2}{\lambda_{33v}} \right), \\ \lambda_{12}^* &= \sum_{v=1}^3 c_v \lambda_{12v} + \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v \lambda_{13v}}{\lambda_{33v}} \right) \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v \lambda_{23v}}{\lambda_{33v}} \right) \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v}{\lambda_{33v}} \right)^{-1} - \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v \lambda_{13v} \lambda_{23v}}{\lambda_{33v}} \right), \\ \lambda_{13}^* &= \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v \lambda_{13v}}{\lambda_{33v}} \right) \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v}{\lambda_{33v}} \right)^{-1}, \\ \lambda_{22}^* &= \sum_{v=1}^3 c_v \lambda_{22v} + \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v \lambda_{23v}}{\lambda_{33v}} \right)^2 \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v}{\lambda_{33v}} \right)^{-1} - \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v \lambda_{23v}^2}{\lambda_{33v}} \right),\end{aligned}$$

$$\lambda_{23}^* = \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v \lambda_{23v}}{\lambda_{33v}} \right) \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v}{\lambda_{33v}} \right)^{-1}, \quad \lambda_{33}^* = \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v}{\lambda_{33v}} \right)^{-1},$$

$$\lambda_{44}^* = \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v}{\lambda_{44v}} \right)^{-1}, \quad \lambda_{55}^* = \left( \sum_{v=1}^3 \frac{c_v}{\lambda_{55v}} \right)^{-1}, \quad \lambda_{66}^* = \sum_{v=1}^3 c_v \lambda_{66v}. \quad (33)$$

**Численные результаты.** Численное исследование влияния несовершенных условий контакта компонентов на эффективные упругие свойства слоистых КМ стохастической структуры проведено для контактирующих слоев из алюмоборосиликатного стекла и отвержденного эпоксидного связующего, которые разделены межфазными слоями. Межфазные слои рассматриваются как третий компонент, состоящий из аппретирующих покрытий, приповерхностных частей матрицы и наполнителя, а также дефектов в виде микротрещин и микропор. Так как некоторая часть материала в окрестности микротрещины не несет нагрузку, то микротрещины моделируются микропорами.

Упругие модули объемного сжатия и сдвига компонентов принимаем соответственно [14] такими:

$$K_c = 33,333 \text{ ГПа}; \quad \mu_c = 25 \text{ ГПа}; \quad K_3 = 3,333 \text{ ГПа}; \quad \mu_3 = 1,111 \text{ ГПа}. \quad (34)$$

Для обеспечения равномерной передачи усилий аппретирующее покрытие целесообразно применять с модулями упругости, промежуточными между соответствующими модулями матрицы и наполнителя. Поэтому в безразмерных единицах, представляющих отношения соответствующих модулей к модулю сдвига матрицы  $\mu_3$ , принимаем такие значения

$$K_1 = 30; \quad \mu_1 = 22,5; \quad K_2 = 3; \quad \mu_2 = 1; \quad K_0 = 16,5; \quad \mu_0 = 11,75. \quad (35)$$

где  $K_0$ ,  $\mu_0$  — соответственно модули объемного сжатия и сдвига материала межфазного слоя без микропор. Соответствующие модули межфазного слоя с пористостью  $p$  определяются формулами [15]

$$K_3 = \frac{4K_0\mu_0 + (1-p)^2}{4\mu_0 + (3K_0 - 4\mu_0)p}, \quad \mu_3 = \frac{\mu_0(9K_0 + 8\mu_0)(1-p)^2}{9K_0 + 8\mu_0 - (3K_0 - 4\mu_0)p}. \quad (36)$$

Объемные содержания наполнителя, связующего и пористого межфазного слоя обозначаем соответственно  $c_1$ ,  $c_2$ ,  $c_3$ . При этом будем пользоваться соотношением

$$c_3 = \frac{h_3}{h_1} c_1, \quad (37)$$

где  $h_1$ ,  $h_3$  — соответственно толщины слоев наполнителя и межфазных слоев. В вычислениях принято

$$\frac{h_3}{h_1} = 0,01.$$

На рис. 1 и 2 представлены зависимости эффективных модулей упругости  $k^*$ ,  $m^*$ ,  $\mu^*$ ,  $\lambda_{13}^*$ ,  $\lambda_{33}^*$  от объемного содержания слоев наполнителя  $c_1$  при заданных пористостях  $p$  межфазных слоев. Вычисления проведены на основе формул (25), (34)–(37) для случая изотропных компонентов слоистого КМ. Здесь объемное содержание наполнителя  $c_1$  находит-

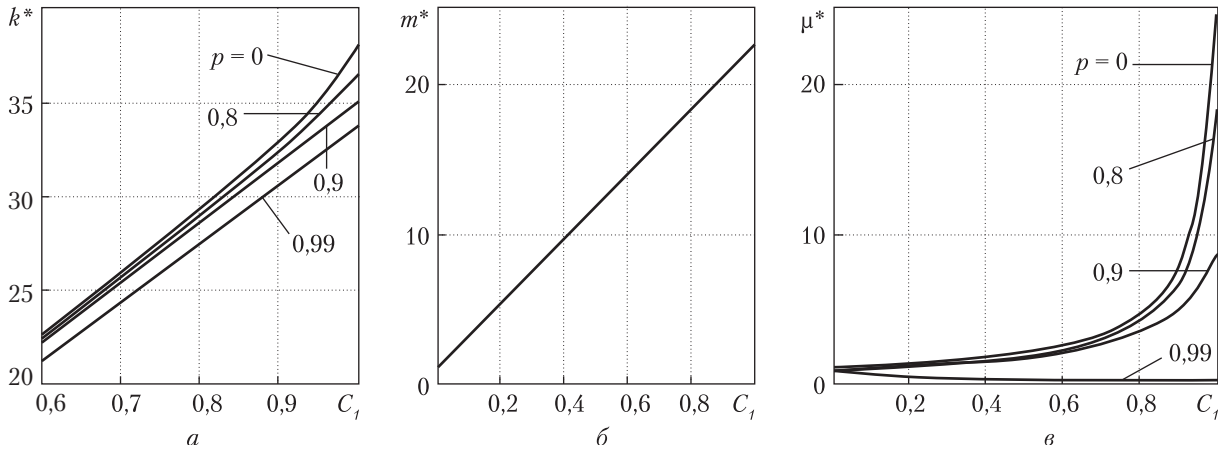


Рис. 1

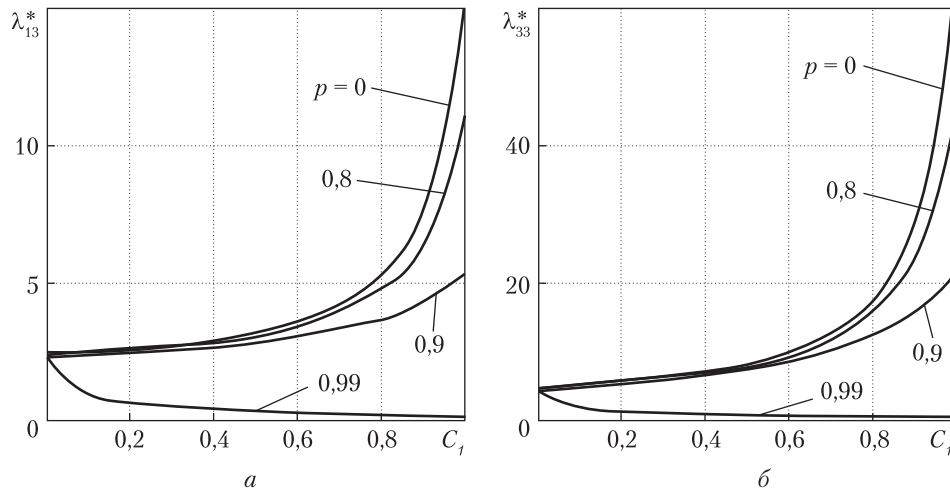


Рис. 2

ся в допустимом интервале  $0 \leq c_1 \leq 0,99$  согласно (37). На рис. 3 приведены зависимости эффективных поперечного  $\nu_{21}^*$  и продольного  $\nu_{31}^*$  коэффициентов Пуассона от объемного содержания наполнителя  $c_1$ , вычисленных согласно формулам

$$\nu_{21}^* = \frac{(k^* - m^*)\lambda_{33}^* - \lambda_{13}^{*2}}{(k^* + m^*)\lambda_{33}^* - \lambda_{13}^{*2}}, \quad \nu_{31}^* = \frac{2m^*\lambda_{13}^{*2}}{(k^* + m^*)\lambda_{33}^* - \lambda_{13}^{*2}}. \quad (38)$$

Анализ зависимостей эффективных модулей упругости от объемного содержания наполнителя  $c_1$  и пористости межфазных слоев  $p$  позволяет сделать следующие выводы. Увеличение пористости  $p$  межфазных слоев, эквивалентное уменьшению адгезии, приводит к уменьшению эффективных модулей  $k^*$ ,  $\mu^*$ ,  $\lambda_{13}^*$ ,  $\lambda_{33}^*$ . При этом с ростом объемного содержания наполнителя  $c_1$  модуль  $k^*$  растет при произвольных значениях пористости  $p$  межфазных слоев. В то же время модули  $\mu^*$ ,  $\lambda_{13}^*$ ,  $\lambda_{33}^*$  растут с ростом  $c_1$  лишь в интервалах пористостей соответственно  $0 \leq p \leq 0,97046$ ,  $0 \leq p \leq 0,94115$ ,  $0 \leq p \leq 0,961713$ . Для более

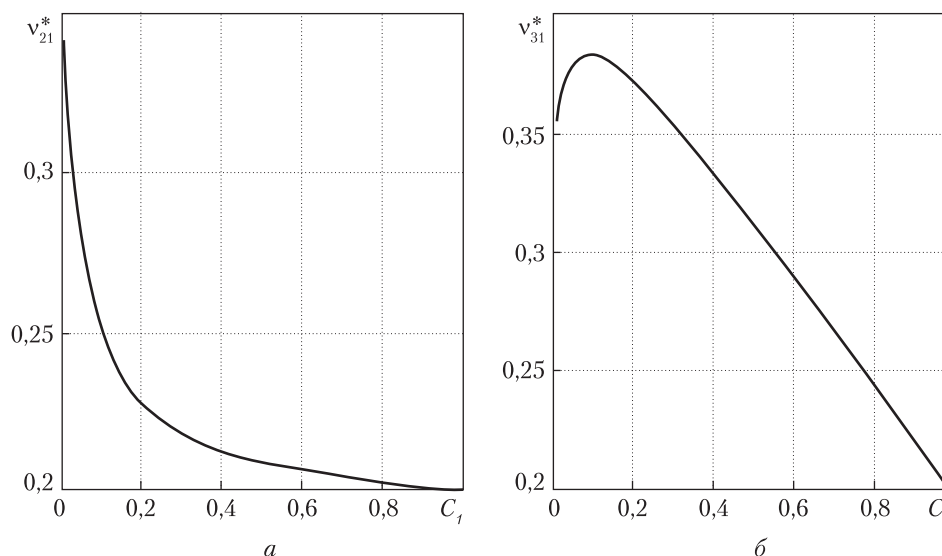


Рис. 3

высоких значений пористости значения соответствующих модулей уменьшаются с ростом  $c_1$ . Однако поперечный модуль сдвига  $m^*$  является исключением из отмеченных закономерностей, его значения не зависят от пористости  $p$  межфазных слоев для всех  $c_1$ .

Кривые зависимостей эффективных коэффициентов Пуассона  $v_{21}^*$ ,  $v_{31}^*$  от объемного содержания наполнителя  $c_1$  имеют соответственно монотонный и немонотонный характер. При этом они не зависят от пористости  $p$  межфазных слоев.

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Khoroshun L.P. Statistical theory of deformation of unidirectional fibrous materials. *Int. Appl. Mech.* 1968. **4**, № 7. P. 5–9.
2. Khoroshun L.P. Elastic properties of materials reinforced by unidirectional short fibers. *Int. Appl. Mech.* 1972. **8**, № 12. P. 1358–1363.
3. Khoroshun L.P. Prediction of thermoelastic properties of materials strengthened by unidirectional discrete fibers. *Int. Appl. Mech.* 1974. **10**, № 12. P. 1288–1293.
4. Nazarenko L., Stolarski H., Khoroshun L., Altenbach H. Effective thermo-elastic properties of random composites with orthotropic and aligned ellipsoidal inhomogeneties. *Int. J. of Solids and Structures*. 2018. **136-137**. P. 220–240.
5. Sangani A.S., Mo G. Elastic interactions in particulate composites with perfect as well as imperfect interfaces. *J. Mech. Phys. Solids*. 1997. **45**. P. 2001–2031.
6. Achenbach J.D., Zhu H. Effect of interfacial zone on mechanical behavior and failure of fiber-reinforced composites. *J. Mech. Phys. Solids*. 1989. **37**. P. 381–393.
7. Benveniste Y. The effective mechanical behavior of composite materials with imperfect contact between the constituents. *Mech. Mater.* 1985. **4**. P. 197–208.
8. Benveniste Y., Miloh T. Imperfect soft and stiff interfaces in two-dimensional elasticity. *Mech. Mater.* 2001. **33**. P. 309–323.
9. Gu S.T., He Q.C. Interfacial discontinuity relations for coupled multifield phenomena and their application to the modeling of thin interphase as imperfect interfaces. *J. Mech. Phys.* 2011. **59**. P. 1413–1426.
10. Gu S.T., Liu J.T., He Q.C. Size-dependent effective elastic moduli of particulate composites with interfacial displacement and traction discontinuities. *Int. J. Solids Struct.* 2014. **51**. P. 2283–2296.



11. Hashin Z. Thermoelastic properties of fiber composites with imperfect interface. *Mech. Mater.* 1990. **8**. P. 333–348.
12. Nazarenko L., Stolarski H., Altenbach H. A model of cylindrical inhomogeneity with spring layer interface and its application to analysis of short-fiber composites. *Composite Structures*. 2017. **160**. P. 635–652.
13. Hashin Z. Thin interphase imperfect interface in elasticity with application to coated fiber composites. *J. Mech. Phys. Solids*. 2002. **50**. P. 2509–2537.
14. Крегерс А.Ф. Математическое моделирование термического расширения пространственно армированных композитов. *Механика композит. материалов*. 1988. № 3. С. 433–441.
15. Khoroshun L.P. Effective elastic properties of unidirectional fibrous composite materials with interfacial defects. *Int. Appl. Mech.* 2018. **54**. № 6. P. 628–641.

Надійшло до редакції 15.02.2019

## REFERENCES

1. Khoroshun, L. P. (1968). Statistical theory of deformation of unidirectional fibrous materials. *Int. Appl. Mech.*, 4, No.7, pp. 5-9.
2. Khoroshun, L. P. (1972). Elastic properties of materials reinforced by unidirectional short fibers. *Int. Appl. Mech.*, 8, No.12, pp. 1358-1363.
3. Khoroshun, L. P. (1974). Prediction of thermoelastic properties of materials strengthened by unidirectional discrete fibers. *Int. Appl. Mech.*, 10, No.12, pp. 1288-1293.
4. Nazarenko, L., Stolarski, H., Khoroshun, L. & Altenbach, H. (2018). Effective thermo-elastic properties of random composites with orthotropic and aligned ellipsoidal inhomogenities. *Int. J. of Solids and Structures*, 136-137, pp. 220-240.
5. Sangani, A. S. & Mo, G. (1997). Elastic interactions in particulate composites with perfect as well as imperfect interfaces. *J. Mech. Phys. Solids*, 45, pp. 2001-2031.
6. Achenbach, J. D. & Zhu, H. (1989). Effect of interfacial zone on mechanical behavior and failure of fiber-reinforced composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 37, pp. 381-393.
7. Benveniste, Y. (1985). The effective mechanical behavior of composite materials with imperfect contact between the constituents. *Mech. Mater.*, 4. pp. 197-208.
8. Benveniste, Y. & Miloh, T. (2001). Imperfect soft and stiff interfaces in two-dimensional elasticity. *Mech. Mater.*, 33, pp. 309-323.
9. Gu, S. T. & He, Q. C. (2011). Interfacial discontinuity relations for coupled multifield phenomena and their application to the modeling of thin interphase as imperfect interfaces. *J. Mech. Phys.*, 59, pp. 1413-1426.
10. Gu, S. T., Liu, J. T. & He, Q. C. (2014). Size-dependent effective elastic moduli of particulate composites with interfacial displacement and traction discontinuities. *Int. J. Solids Struct.*, 51, pp. 2283-2296.
11. Hashin, Z. (1990). Thermoelastic properties of fiber composites with imperfect interface. *Mech. Mater.*, 8, pp. 333-348.
12. Nazarenko, L., Stolarski, H. & Altenbach, H. (2017). A model of cylindrical inhomogeneity with spring layer interface and its application to analysis of short-fiber composites. *Composite Structures*, 160, pp. 635-652.
13. Hashin, Z. (2002). Thin interphase imperfect interface in elasticity with application to coated fiber composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 50, pp. 2509-2537.
14. Kregers, A. F. (1988). Mathematical modeling of thermal expansion of spatially reinforced composites. *Mechanics of Composite Materials*, No. 3, pp. 433-441 (in Russian).
15. Khoroshun, L. P. (2018). Effective elastic properties of unidirectional fibrous composite materials with interfacial defects. *Int. Appl. Mech.*, 54, No. 6, pp. 628-641.

Received 15.02.2019

Л.П. Хорошун, О.І. Левчук

Інститут механіки ім. С.П. Тимошенка НАН України, Київ  
E-mail: lkhoshun@ukr.net, 2013levchuk@gmail.com

### ЕФЕКТИВНІ ПРУЖНІ ВЛАСТИВОСТІ ШАРУВАТИХ КОМПОЗИТІВ ПРИ НЕДОСКОНАЛІЙ АДГЕЗІЇ

Розглянуто задачу про ефективні пружні властивості шаруватого композитного матеріалу стохастичної структури при недосконалій адгезії, яка моделюється міжфазним шаром з дефектами у вигляді мікропор. На поверхнях поділу міжфазного шару з шаром наповнювача і матриці виконуються умови досконалого контакту у вигляді неперервності переміщень і поверхневих напружень. Міжфазні шари розглядаються як третій компонент, що складається із пористих приповерхневих шарів двох компонентів і апретуючих покриттів. При розв'язанні задачі використано стохастичні диференціальні рівняння в переміщеннях для багатокомпонентного КМ шаруватої структури з ізотропними і анізотропними компонентами. На основі отриманого розв'язку досліджено ефективні властивості трикомпонентного КМ шаруватої структури. Побудовано криві залежностей ефективних пружних постійних шаруватого матеріалу з ізотропними компонентами від об'ємного вмісту наповнювача і пористості міжфазного шару.

**Ключові слова:** недосконала адгезія, ефективні пружні властивості, шаруватий композит, стохастичні рівняння, умови недосконалого контакту, пористий міжфазний шар.

L.P. Khoroshun, O.I. Levchuk

S.P. Timoshenko Institute of Mechanics of the NAS of Ukraine, Kiev  
E-mail: lkhoshun@ukr.net, 2013levchuk@gmail.com

### EFFECTIVE ELASTIC PROPERTIES OF LAYERED COMPOSITES UNDER IMPERFECT ADHESION

The problem of the effective elastic properties of a layered composite material of a stochastic structure with imperfect adhesion, which is modeled by an interphase layer with defects in the form of micropores, is considered. On the interfaces of the interphase layer with the layers of a filler and a matrix, perfect contact conditions are performed in the form of continuity of displacements and surface stresses. Interphase layers are considered as the third component, consisting of the surface layers of two components and the coupling coatings. The solution of the problem is based on stochastic differential equations of elasticity in displacements for a multicomponent composite material of the layered structure with isotropic and anisotropic components. On the basis of the solution, the effective properties of a three-component composite materials of the layered structure are investigated. The dependences of the effective elastic constants of the layered material with isotropic components on the volume content of a filler and the porosity of the interphase layer are constructed.

**Keywords:** imperfect adhesion, effective elastic properties, layered composite, stochastic equations, imperfect interface conditions, porous interphase layers.

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.05.067>

УДК 621.315.592

**Г.П. Гайдар**

Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ

E-mail: [gaydar@kinr.kiev.ua](mailto:gaydar@kinr.kiev.ua)

## До методології визначення тензоопору $n$ -Ge та $n$ -Si у кристалографічних напрямках $\langle 110 \rangle$

Представлено академіком НАН України О.Є. Бєляєвим

*У рамках теорії анізотропного розсіяння для багатодолинних напівпровідників  $n$ -Ge та  $n$ -Si одержано корисні для практичного застосування вирази, які дають змогу розраховувати значення тензоопору в насиченні для кристалографічних напрямків, де цей ефект незначний, за результатами вимірювання тензоопору в інших кристалографічних напрямках, де вказаний ефект значний за величиною.*

**Ключові слова:** кремній, германій, тензоопір, параметр анізотропії рухливості.

Останнім часом велика увага приділяється дослідженню впливу направлених пружних деформацій на фізичні властивості напівпровідників, що зумовлено низкою чинників.

Одновісна деформація знижує симетрію кристала, змінюючи його фізичні властивості. Направлені деформаційні впливи на кристали, що змінюють як міжатомні відстані, так і симетрію ґратки, спричиняють істотні зміни електронної підсистеми багатодолинних напівпровідників. Фізичні властивості кристалів кубічної симетрії, які були ізотропними у природному стані кристала, у разі направленої деформації набувають анізотропного характеру [1].

Кількісні зміни кінетичних коефіцієнтів, зумовлені одновісними пружними деформаціями, за порядком величин є набагато більшими, ніж зміни, що спричинені такими самими за величиною, але всебічними деформаціями (гідростатичним тиском).

У разі одновісного деформування кристалів можуть з'являтися зовсім нові фізичні явища. Наприклад, саме завдяки використанню направленої деформації вперше було описано явище, назване фотоп'єзоелектричним ефектом, яке полягало в появі електричної різниці потенціалів у деформованому та освітленому зразку германію [2].

Оскільки ефект тензоопору досить чутливий до наявності глибоких рівнів, то особливо перспективними і результативними є дослідження у разі одновісної пружної деформації кристалів із домішковими центрами, які мають глибокі енергетичні рівні у забороненій зоні [3]. Вивчення поведінки глибоких центрів у разі деформації дає можливість визначити характер зв'язку локальних електронних станів цих центрів із найближчими зонами, тип

симетрії дефекту, ступінь деформації внутрішніх зв'язків у ґратці. У багатодолинних напівпровідниках типу  $n$ -Ge та  $n$ -Si властивості електронів, що належать одній долині, важко піддаються дослідженню внаслідок симетричного розташування еліпсоїдів енергії в просторі квазіімпульсів  $\vec{k}$ , отже, ізотропного характеру кінетичних властивостей усього кристала. Штучно знижуючи симетрію кристала за допомогою одновісної деформації, можна отримати інформацію, яка характеризує кожен екстремум окремо.

За допомогою одновісних деформацій можна змінювати властивості напівпровідників у певному потрібному напрямку, отримувати матеріали з новими, наперед заданими властивостями. Розробка високоефективних нових технологій, що використовують ефекти впливу одновісного тиску в епітаксійних шарах (МОН (метал—окисел—напівпровідник) транзистори з  $n$ - і  $p$ -типом провідності фірми Intel Corporation [4, 5]), розвиток нового напрямку електроніки, який одержав назву велетроніка (valleytronics) [6, 7], — усе це надає нового імпульсу дослідженням впливу направлених пружних деформацій на багатодолинні напівпровідники типу  $n$ -Ge та  $n$ -Si.

На сьогодні високі вимоги в області техніки щодо надійності роботи напівпровідникових приладів та їхньої стійкості до зовнішніх впливів спонукають дослідників до застосування методів, які дають найбільш точні й однозначні результати в ході визначення основних параметрів матеріалів у широких інтервалах змін зовнішніх умов, серед яких чільне місце справедливо займає деформаційна метрологія [8]. Так, значна інформативність методу тензоопору дає змогу глибше й детальніше досліджувати властивості напівпровідників, з високим ступенем достовірності вивчати особливості їх зонної структури, анізотропію фізичних властивостей, надійно визначати параметри і величини, які характеризують механізми розсіяння носіїв заряду [9–12].

У ході експериментального дослідження властивостей напівпровідників час від часу виникає потреба вимірювати малі за значенням параметри або параметри, які досить чутливі до впливу незначних неоднорідностей, що існують у кристалі. Однак, коли важкодоступний для вимірювання параметр пов'язаний співвідношенням із легко вимірюваним, то доцільно експериментально отримати останній, а потім, використовуючи математичні вирази, обчислити параметр, величину якого необхідно визначити [13].

Відомо [1], що експериментально виміряти тензоопір кристалів  $n$ -Si та  $n$ -Ge у разі прикладання механічного напруження стиснення у певних кристалографічних напрямках (типу  $\langle 110 \rangle$ ) досить складно, оскільки величина його мала. Мета даного дослідження полягала у встановленні в рамках теорії анізотропного розсіяння таких співвідношень, які дають змогу за величиною поздовжнього тензоопору стиснення, виміряного в кристалографічних напрямках  $\langle 100 \rangle$  для  $n$ -Si та  $\langle 111 \rangle$  для  $n$ -Ge, де його величина максимальна, обчислювати тензоопір у напрямках типу  $\langle 110 \rangle$ , де ефект тензоопору виявляється слабо.

Ефект тензоопору (зміна питомого опору багатодолинних напівпровідників у разі одновісної пружної деформації) в  $n$ -Si та  $n$ -Ge пов'язаний із деформаційним порушенням енергетичної еквівалентності ізоенергетичних еліпсоїдів у таких дослідах та міжмінімумним перерозподілом носіїв заряду при незмінній їх концентрації в зоні провідності ( $c$ -зоні), тобто з деформаційно-індукованими переходами носіїв заряду в мінімуми зі зниженою рухливістю.

На прикладі  $n$ -Si розглянемо зміну питомого опору у разі накладання механічного напруження  $X$ , коли  $\vec{X} \parallel \vec{J} \parallel [100]$  (де  $\vec{J}$  — струм крізь зразок). Внаслідок деформації  $n$ -Si у

напрямку [100] мінімуми 2, 2' (рис. 1) опускаються вниз за шкалою енергій, а мінімуми 1, 1' і 3, 3' піднімаються вгору, що спричиняє перерозподіл електронів між мінімумами.

За відсутності тиску ( $X = 0$ ) питома електропровідність *n*-Si у напрямку [100] описується співвідношенням

$$\sigma_0^{[100]} = \sigma_0 = \frac{1}{\rho_0^{[100]}} = 2en_0\mu_{\parallel} + 4en_0\mu_{\perp}, \quad (1)$$

де  $\rho_{\parallel}^{[100]} = \rho_{\perp}$  – питомий опір недеформованого *n*-Si;  $\mu_{\parallel}$ ,  $\mu_{\perp}$  – рухливість носіїв заряду відповідно вздовж і поперек головної осі ізоенергетичного еліпсоїда;  $n_0$  – концентрація електронів в одному мінімумі до деформації кристала;  $e$  – заряд електрона.

У разі накладання досить великого механічного напруження  $X$  у напрямку [100], що забезпечує повний перехід усіх носіїв заряду в еліпсоїди 2–2' (рис. 1), які опускаються (за шкалою енергій), провідність *n*-Si у напрямку [100] задається виразом

$$\sigma_{\infty}^{[100]} = \frac{1}{\rho_{\infty}^{[100]}} = 6en_0\mu_{\parallel}. \quad (2)$$

Знайдемо відношення виразів (1) і (2):

$$\frac{\sigma_0}{\sigma_{\infty}^{[100]}} = \frac{\rho_{\infty}^{[100]}}{\rho_0} = \frac{2}{3} \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} + \frac{1}{3}. \quad (3)$$

Враховуючи результати визначення параметра анізотропії рухливості  $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$  [1], одержимо

$$\frac{\rho_{\infty}^{[100]}}{\rho_0} = \frac{1}{3} (2K + 1) \quad (4)$$

або отримаємо зв'язок параметра анізотропії рухливості з питомим опором у напрямку, в якому тензоопір максимальний:

$$K = \frac{3}{2} \frac{\rho_{\infty}^{[100]}}{\rho_0} - \frac{1}{2}. \quad (5)$$

У випадку *n*-Ge за умови  $\vec{X} \parallel \vec{J} \parallel [111]$  можна одержати аналогічне співвідношення для параметра анізотропії рухливості:

$$K = \frac{3}{2} \frac{\rho_{\infty}^{[111]}}{\rho_0} - \frac{1}{2}. \quad (6)$$

Тут  $\rho_{\infty}^{[100]} = \lim_{X \rightarrow \infty} \rho(X)$  та  $\rho_{\infty}^{[111]} = \lim_{X \rightarrow \infty} \rho(X)$  – значення питомого опору у разі прикладання механічного напруження  $X$ , яке забезпечує повне переселення носіїв заряду в мінімуми енергії (два чи один), розташовані в напрямку осі деформації ([100] чи [111]).

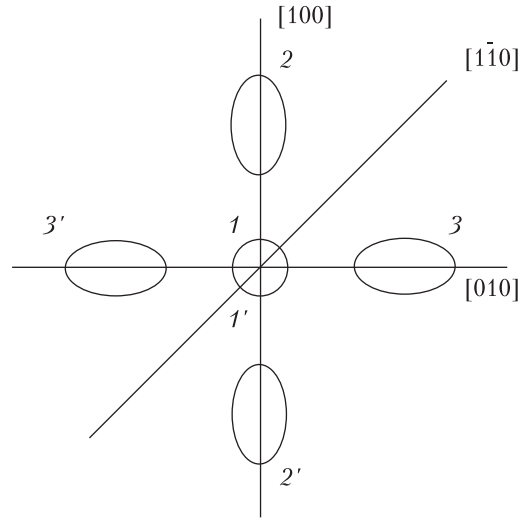


Рис. 1. Взаємне розміщення ізоенергетичних еліпсоїдів у зоні провідності *n*-Si

Оскільки для  $n$ -Ge за умов  $\vec{X} \parallel \vec{J} \parallel [111]$  та  $\vec{X} \parallel \vec{J} \parallel [110]$  відповідно до [14]

$$\rho_{\infty}^{[110]} = \frac{1}{en_e} \frac{3}{(\mu_{\perp} + 2\mu_{\parallel})}, \quad (7)$$

$$\rho_{\infty}^{[111]} = \frac{1}{en_e\mu_{\parallel}} \quad (8)$$

( $n_e$  — повна концентрація носіїв заряду в кристалі), то параметр анізотропії рухливості в окремо взятому ізоенергетичному еліпсоїді матиме вигляд

$$K = 3 \frac{\rho_{\infty}^{[111]}}{\rho_{\infty}^{[110]}} - 2. \quad (9)$$

Аналогічно для  $n$ -Si за умов  $\vec{X} \parallel \vec{J} \parallel [100]$  та  $\vec{X} \parallel \vec{J} \parallel [110]$  відповідно до [15] отримаємо зв'язок параметра анізотропії рухливості з комбінованим відношенням, чисельник якого характеризує максимальний прояв тензоопору, а знаменник — один із напрямків, в якому тензоопір (як в  $n$ -Si, так і в  $n$ -Ge) незначний:

$$K = 2 \frac{\rho_{\infty}^{[100]}}{\rho_{\infty}^{[110]}} - 1. \quad (10)$$

Оскільки ліві частини виразів (6) і (9), а також (5) і (10) рівні між собою, то і праві частини цих виразів як для  $n$ -Ge, так і для  $n$ -Si можна порівняти між собою, тобто

$$\text{для } n\text{-Ge} \quad \frac{3}{2} \frac{\rho_{\infty}^{[111]}}{\rho_0} - \frac{1}{2} = 3 \frac{\rho_{\infty}^{[111]}}{\rho_{\infty}^{[110]}} - 2, \quad (11)$$

$$\text{для } n\text{-Si} \quad \frac{3}{2} \frac{\rho_{\infty}^{[100]}}{\rho_0} - \frac{1}{2} = 2 \frac{\rho_{\infty}^{[100]}}{\rho_{\infty}^{[110]}} - 1. \quad (12)$$

Після розв'язання кожного з рівнянь (11) і (12) відносно  $\rho_{\infty}^{[110]}/\rho_0$  отримаємо

$$\text{для } n\text{-Ge} \quad \frac{\rho_{\infty}^{[110]}}{\rho_0} = 2 \frac{\rho_{\infty}^{[111]}/\rho_0}{1 + \frac{\rho_{\infty}^{[111]}}{\rho_0}}, \quad (13)$$

$$\text{для } n\text{-Si} \quad \frac{\rho_{\infty}^{[110]}}{\rho_0} = 4 \frac{\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0}{1 + 3 \frac{\rho_{\infty}^{[100]}}{\rho_0}}. \quad (14)$$

Знайдені вирази (13) і (14) дають змогу як у випадку  $n$ -Ge, так і для  $n$ -Si надійно отримати відносно невеликі за своїми значеннями величини тензоопору в кристалографічних напрямках типу  $\langle 110 \rangle$  ( $\rho_{\infty}^{(110)}/\rho_0$ ) за найбільшими (із можливих) значеннями тензоопору, вимірними у разі прикладання механічного напруження вздовж головних кристалографічних напрямків багатодолинних напівпровідників ( $\rho_{\infty}^{(111)}/\rho_0$  у випадку  $n$ -Ge та  $\rho_{\infty}^{(100)}/\rho_0$  у випадку  $n$ -Si).

Для експериментальної перевірки одержаних співвідношень були використані кристали *n-Ge* та *n-Si* з таким рівнем легування:

$$n\text{-Ge: } \rho_{300\text{ K}} = 17 \text{ Ом}\cdot\text{см}, n_e \equiv N_{\text{Sb}} = 9,5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3};$$

$$n\text{-Si: } \rho_{300\text{ K}} = 56 \text{ Ом}\cdot\text{см}, n_e \equiv N_{\text{P}} = 7,14 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}.$$

Тензоопір вимірювали при температурі рідкого азоту в різних кристалографічних напрямках: у випадку *n-Ge* за умов  $\vec{X} \pm \parallel \vec{J} \parallel [111]$  та  $\vec{X} \parallel \vec{J} \parallel [110]$ , у випадку *n-Si* – при  $\vec{X} \parallel \vec{J} \parallel [100]$  та  $\vec{X} \parallel \vec{J} \parallel [110]$ . Розміри зразків були  $0,7 \times 0,7 \times 10 \text{ мм}^3$ . Результати вимірювань наведено на рис. 2 і 3.

Після підстановки одержаних експериментальних даних для *n-Ge*

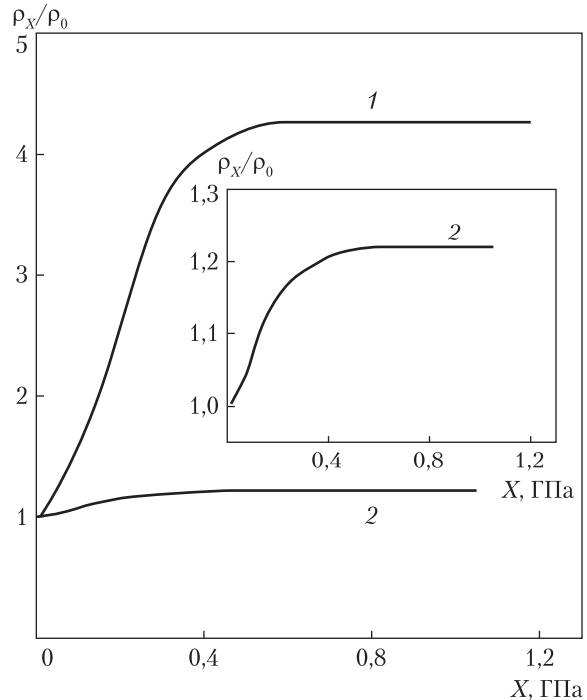
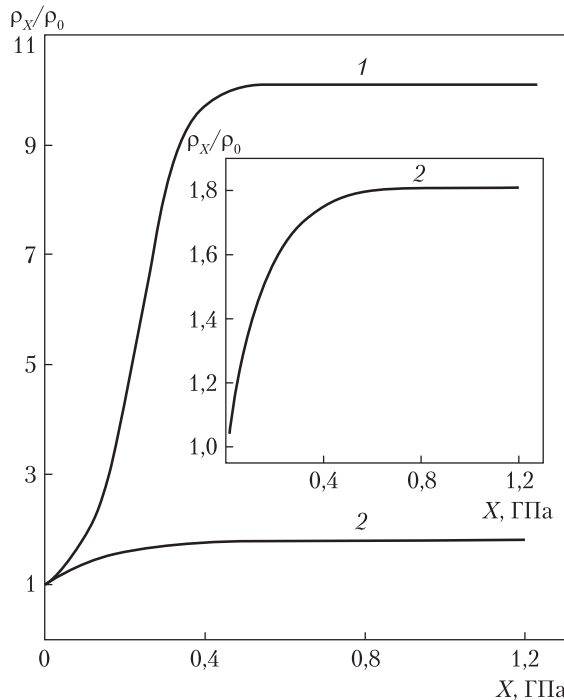
$$\frac{\rho_{\infty}^{[111]}}{\rho_0} = 10,1$$

(див. рис. 2, крива 1) та для *n-Si*

$$\frac{\rho_{\infty}^{[100]}}{\rho_0} = 4,27$$

(див. рис. 3, крива 1) у формули (13) і (14) відповідно матимемо для *n-Ge*

$$\frac{\rho_{\infty}^{[110]}}{\rho_0} \approx 1,82, \text{ а для } n\text{-Si} - \frac{\rho_{\infty}^{[110]}}{\rho_0} \approx 1,24.$$



**Рис. 2.** Залежності поздовжнього тензоопору  $\rho_X/\rho_0 = f(X)$  для *n-Ge*, виміряні при  $T = 77 \text{ K}$  за умов: 1 –  $\vec{X} \parallel \vec{J} \parallel [111]$ , 2 –  $\vec{X} \parallel \vec{J} \parallel [110]$ . На вставці крива 2 у збільшеному масштабі

**Рис. 3.** Залежності поздовжнього тензоопору  $\rho_X/\rho_0 = f(X)$  для *n-Si*, виміряні при  $T = 77 \text{ K}$  за умов: 1 –  $\vec{X} \parallel \vec{J} \parallel [100]$ , 2 –  $\vec{X} \parallel \vec{J} \parallel [110]$ . На вставці крива 2 у збільшеному масштабі



Як видно з рис. 2 і 3 (криві 2), розраховані таким чином дані з тензоопору для кристалографічного напрямку [110] виявилися близькими до отриманих експериментально для цього ж напрямку

$$\left(\text{для } n\text{-Ge } \frac{\rho_{\infty}^{[110]}}{\rho_0} = 1,807, \text{ а для } n\text{-Si} - \frac{\rho_{\infty}^{[110]}}{\rho_0} = 1,22\right),$$

в якому тензоопір для обох випадків є малим. Остання обставина істотно ускладнює безпосереднє визначення даних з тензоопору кремнію та германію для кристалографічного напрямку  $\langle 110 \rangle$  експериментально. Таким чином, показано, що обидва одержаних вирази (13) і (14) знаходять експериментальне підтвердження в межах точності проведених вимірювань.

Отже, у рамках теорії анізотропного розсіяння встановлено для  $n$ -Ge та  $n$ -Si співвідношення (13) і (14), які дають змогу замість досить складних вимірювань тензоопору у фізично еквівалентних напрямках  $\langle 110 \rangle$ , в яких зазначений ефект слабко виражений, розраховувати зміни питомого опору з направленим тиском, що виводить функцію  $\rho_X/\rho_0 = f(X)$  на насичення, використовуючи надійно вимірювані в експериментах дані з тензоопору в інших кристалографічних напрямках ( $\langle 111 \rangle$  у випадку  $n$ -Ge та  $\langle 100 \rangle$  у випадку  $n$ -Si), в яких зміни питомого опору з тиском є максимальними.

Запропонований підхід щодо методології визначення важкодоступних для вимірювань параметрів у напівпровідниках, які мають малі значення, за дослідними даними іншої величини, що обчислюється досить просто, може виявитися корисним у разі проведення експериментальних досліджень.

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Баранський П.І., Федосов А.В., Гайдар Г.П. Фізичні властивості кристалів кремнію та германію в полях ефективного зовнішнього впливу. Луцьк: Надстир'я, 2000. 279 с.
2. Кикоин И.К., Лазарев С.Д. Новый фотопьезоэлектрический эффект в полупроводниках. *ЖЭТФ*. 1965. 47, № 2. С. 780–781.
3. Федосов С.А., Хвищун М.В., Шинкарук С.В. Вплив концентрації домішок на зміну положення глибокого рівня  $E_c - 0,2$  еВ при одновісній пружній деформації в  $n$ -Ge  $\langle Au \rangle$ . *Наук. вісн. Волин. нац. ун-ту ім. Лесі Українки. Фіз. науки*. 2010. № 29. С. 37–43.
4. Thompson S., Anand N., Armstrong M., Auth C., Arcot B., Alavi M., Bai P., Bielefeld J., Bigwood R., Brandenburg J., Buehler M., Cea S., Chikarmane V., Choi C., Frankovic R., Ghani T., Glass G., Han W., Hoffmann T., Hussein M., Jacob P., Jain A., Jan C., Joshi S., Kenyon C., Klaus J., Klopčič S., Luce J., Ma Z., McIntyre B., Mistry K., Murthy A., Nguyen P., Pearson H., Sandford T., Schweinfurth R., Shaheed R., Sivakumar S., Taylor M., Tufts B., Wallace C., Wang P., Weber C., Bohr M. A 90 nm logic technology featuring 50 nm strained silicon channel transistors, 7 layers of Cu interconnects, low k ILD, and 1  $\mu\text{m}^2$  SRAM cell. Technical Digest: Proceedings of International Electron Devices Meeting (San Francisco, 8–11 Dec. 2002). Piscataway, NJ: IEEE, 2002. P. 61–64. doi: <https://doi.org/10.1109/IEDM.2002.1175779>
5. Ghani T., Armstrong M., Auth C., Bost M., Charvat P., Glass G., Hoffmann T., Johnson K., Kenyon C., Klaus J., McIntyre B., Mistry K., Murthy A., Sandford J., Silberstein M., Sivakumar S., Smith P., Zawadzki K., Thompson S., Bohr M. A 90 nm high volume manufacturing logic technology featuring novel 45 nm gate length strained silicon CMOS transistors. Technical Digest: Proceedings of International Electron Devices Meeting (Washington, 8–10 Dec. 2003). Piscataway, NJ: IEEE, 2003. P. 978–980. doi: <https://doi.org/10.1109/IEDM.2003.1269442>
6. Nebel C.E. Valleytronics: Electrons dance in diamond. *Nat. Mater.*, 2013. 12, № 8. P. 690–691. doi: <https://doi.org/10.1038/nmat3724>



7. Culcer D., Saraiva A.L., Koiller B., Hu X., Sarma S.D. Valley-based noise-resistant quantum computation using Si quantum dots. *Phys. Rev. Lett.* 2012. **108**. № 12. 126804. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.126804>
8. Гайдар Г.П. Тензосопротивление как источник информации о параметре анизотропии подвижности  $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$  в многодолинных полупроводниках и некоторые новые возможности деформационной метрологии. *Электронная обработка материалов*. 2015. **51**, № 2. С. 85–92.
9. Gaidar G.P., Baranskii P.I. Thermoelectric properties of transmutation doped silicon crystals. *Physica B: Condensed Matter*. 2014. **441**. P. 80–88. doi: <https://doi.org/10.1016/j.physb.2014.02.011>
10. Гайдар Г.П., Баранський П.І. Концентраційні залежності параметра анізотропії рухливості  $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$  і параметра анізотропії термоЕРС захоплення електронів фононами  $M = \alpha_{\parallel}^{\Phi}/\alpha_{\perp}^{\Phi}$  в  $n$ -Ge та  $n$ -Si. *Термоелектрика*. 2014. № 5. С. 22–30.
11. Федосов А.В., Луньов С.В., Федосов С.А. Визначення константи деформаційного потенціалу  $\Xi_d$  в  $n$ -Ge методом п'єзоопору. *Наук. вісн. Волин. нац. ун-ту ім. Лесі Українки. Фіз. науки*. 2010. № 6. С. 38–44.
12. Будзуляк С.І. Тензорезистивні ефекти в сильно деформованих кристалах  $n$ -Si та  $n$ -Ge. *Фізика і хімія твердого тіла*. 2012. **13**, № 1. С. 34–39.
13. Gaidar G.P. On methodology of measuring parameters with the increased sensitivity to residual or irradiation induced inhomogeneities in semiconductors. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*. 2009. **12**, № 4. P. 324–327.
14. Баранский П.И., Елизаров А.И., Коломоец В.В. Определение характеристических параметров  $\mu_{\parallel}$  и  $\mu_{\perp}$  отдельно взятого изоэнергетического эллипсоида в многодолинных полупроводниках. *ФТП*. 1974. **8**, № 1. С. 200–202.
15. Баранский П.И., Буда И.С., Даховский И.В. Коломоец В.В. Электрические и гальваномагнитные явления в анизотропных полупроводниках. Киев: Наук. думка, 1977. 270 с.

Надійшло до редакції 28.02.2019

## REFERENCES

1. Baranskii, P. I., Fedosov, A. V. & Gaidar, G. P. (2000). Physical properties of silicon and germanium crystals in the fields of effective external influence. Lutsk: Nadstyria (in Ukrainian).
2. Kikoin, I. K. & Lazarev, S. D. (1965). New photopiezoelectric effect in semiconductors. *Zhurn. eksperim. i teoret. fiziki*, 20, No. 2, pp. 780-781 (in Russian).
3. Fedosov, S. A., Khvyshchun, M. V. & Shynkaruk, S. V. (2010). Effect of the concentration of impurities on the change in position of the deep level  $E_c - 0.2$  eV under uniaxial elastic deformation in  $n$ -Ge  $\langle Au \rangle$ . *Nauk. visnyk Volynskoho nats. un-tu im. Lesi Ukrainky. Fiz. nauky*, No. 29, pp. 37-43 (in Ukrainian).
4. Thompson, S., Anand, N., Armstrong, M., Auth, C., Arcot, B., Alavi, M., Bai, P., Bielefeld, J., Bigwood, R., Brandenburg, J., Buehler, M., Cea, S., Chikarmane, V., Choi, C., Frankovic, R., Ghani, T., Glass, G., Han, W., Hoffmann, T., Hussein, M., Jacob, P., Jain, A., Jan, C., Joshi, S., Kenyon, C., Klaus, J., Kloplic, S., Luce, J., Ma, Z., McIntyre, B., Mistry, K., Murthy, A., Nguyen, P., Pearson, H., Sandford, T., Schweinfurth, R., Shaheed, R., Sivakumar, S., Taylor, M., Tufts, B., Wallace, C., Wang, P., Weber, C. & Bohr, M. (2002). A 90 nm logic technology featuring 50 nm strained silicon channel transistors, 7 layers of Cu interconnects, low k ILD, and 1  $\mu\text{m}^2$  SRAM cell. *Proceedings of the International Electron Devices Meeting Technical Digest* (pp. 61-64), San Francisco. doi: <https://doi.org/10.1109/IEDM.2002.1175779>
5. Ghani, T., Armstrong, M., Auth, C., Bost, M., Charvat, P., Glass, G., Hoffmann, T., Johnson, K., Kenyon, C., Klaus, J., McIntyre, B., Mistry, K., Murthy, A., Sandford, J., Silberstein, M., Sivakumar, S., Smith, P., Zawadzki, K., Thompson, S. & Bohr, M. (2003). A 90 nm high volume manufacturing logic technology featuring novel 45 nm gate length strained silicon CMOS transistors. *Proceedings of the International Electron Devices Meeting Technical Digest* (pp. 978-980), Washington. doi: <https://doi.org/10.1109/IEDM.2003.1269442>
6. Nebel, C. E. (2013). Valleytronics: Electrons dance in diamond. *Nat. Mater.*, 12, No. 8, pp. 690-691 doi: <https://doi.org/10.1038/nmat3724>
7. Culcer, D., Saraiva, A. L., Koiller, B., Hu, X. & Sarma, S. D. (2012). Valley-based noise-resistant quantum computation using Si quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, 108, No. 12, 26804. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.126804>

8. Gaidar, G. P. (2015). Tensorresistance as an information source on mobility anisotropy parameter  $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$  in multivalley semiconductors and certain new possibilities of deformation metrology. Surf. Eng. Appl. Electrochem., 51, No. 2, pp. 188-195.
9. Gaidar, G. P. & Baranskii, P. I. (2014). Thermoelectric properties of transmutation doped silicon crystals. Physica B: Condensed Matter, 441, pp. 80-88. doi: <https://doi.org/10.1016/j.physb.2014.02.011>
10. Gaidar, G. P. & Baranskii, P. I. (2014). Concentration dependences of the anisotropy parameter of mobility  $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$  and the anisotropy parameter of electron-phonon drag thermopower  $M = \alpha_{\parallel}^{\Phi}/\alpha_{\perp}^{\Phi}$  in *n*-Ge and *n*-Si. J. Thermoelectricity, No. 5, pp. 21-28.
11. Fedosov, A. V., Lunov, S. V. & Fedosov, S. A. (2010). Determination of the constant of the deformation potential  $\Xi_d$  in *n*-Ge by the piezoresistance method. Nauk. visnyk Volynskoho nats. un-tu im. Lesi Ukrainky. Fiz. nauky, No. 6, pp. 38-44 (in Ukrainian).
12. Budzuliak, S. I. (2012). Tensorresistive effects in the strongly deformed *n*-Si and *n*-Ge crystals. Fizyka i khimiia tverdoho tila, 13, No. 1, pp. 34-39 (in Ukrainian).
13. Gaidar, G. P. (2009). On methodology of measuring parameters with the increased sensitivity to residual or irradiation induced inhomogeneities in semiconductors. Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics, 12, No. 4, pp. 324-327.
14. Baranskii, P. I., Yelizarov, A. I. & Kolomoets, V. V. (1974). Determination of the characteristic parameters  $\mu_{\parallel}$  and  $\mu_{\perp}$  of the single isoenergetic ellipsoid in multi-valley semiconductors. Fizika i tekhnika poluprovodnikov, 8, No. 1, pp. 200-202 (in Russian).
15. Baranskii, P. I., Buda, I. S., Dahovskiy, I. V. & Kolomoets, V. V. (1977). Electrical and galvanomagnetic phenomena in anisotropic semiconductors. Kiev: Naukova Dumka (in Russian).

Received 28.02.2019

Г.П. Гайдар

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев

E-mail: [gaydar@kinr.kiev.ua](mailto:gaydar@kinr.kiev.ua)

#### К МЕТОДОЛОГИИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕНЗОСОПРОТИВЛЕНИЯ *n*-Ge И *n*-Si В КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ НАПРАВЛЕНИЯХ $\langle 110 \rangle$

В рамках теории анизотропного рассеяния для многодолинных полупроводников *n*-Ge и *n*-Si получены полезные для практического применения выражения, которые позволяют рассчитывать значения тензосопротивления в насыщении для кристаллографических направлений, где этот эффект незначительный, по результатам измерений тензосопротивления в других кристаллографических направлениях, где указанный эффект значительный по величине.

**Ключевые слова:** кремний, германий, тензосопротивление, параметр анизотропии подвижности.

G.P. Gaidar

Institute for Nuclear Research of the NAS of Ukraine, Kiev

E-mail: [gaydar@kinr.kiev.ua](mailto:gaydar@kinr.kiev.ua)

#### ON THE METHODOLOGY OF TENSORESISTANCE DETERMINATION FOR *n*-Ge AND *n*-Si IN THE CRYSTALLOGRAPHIC DIRECTIONS $\langle 110 \rangle$

In the framework of the theory of anisotropic scattering, the expressions useful for the practical application are obtained for many-valley semiconductors such as *n*-Ge and *n*-Si. These relations allow us to calculate the tensorresistance in saturation for crystallographic directions, where this effect is very small, by using the measurement results of tensorresistance in other crystallographic directions, where this effect has large values.

**Keywords:** silicon, germanium, tensorresistance, anisotropy parameter of mobility.

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.05.075>

УДК 547.859.2

**Р.М. Соломянний<sup>1</sup>, В.С. Броварець<sup>1</sup>, О.В. Шабликінa<sup>1,2</sup>,  
В.С. Москвіна<sup>1,2</sup>, В.П. Хиля<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України, Київ

<sup>2</sup> Київський національний університет ім. Тараса Шевченка

E-mail: shablykina@ukr.net

## **8-(Метилсульфоніл)-2,6-дигідроімідазо[1,2-с]піримідин-5(3H)-они — нові гетероциклічні похідні сульфонів з противірусною активністю**

*Представлено членом-кореспондентом НАН України В.П. Хилюю*

*Внаслідок взаємодії 3-(R-аміно)-2-(метилсульфоніл)акрилонітрилів з 1-ізоціанато-2-хлоретаном отримано нові сульфонової аналогії цитозину — 8-(метилсульфоніл)-6-R-2,6-дигідроімідазо[1,2-с]піримідин-5(3H)-они. Встановлено противірусну активність 8-(метилсульфоніл)-6-бензил-2,6-дигідроімідазо[1,2-с]піримідин-5(3H)-ону.*

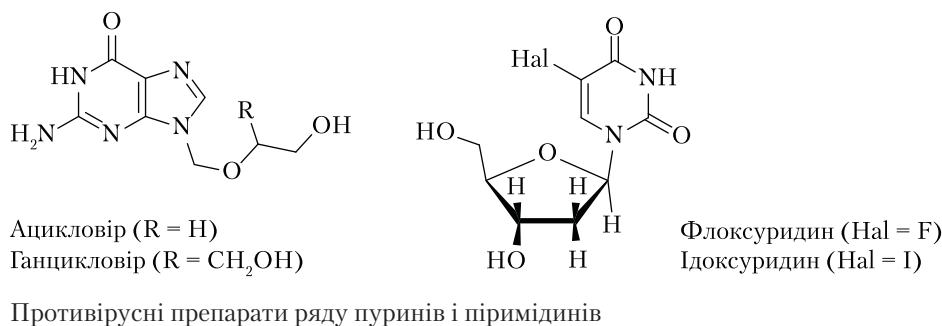
**Ключові слова:** 3-аміно-2-(метилсульфоніл)акрилонітрили, 8-(метилсульфоніл)-2,6-дигідроімідазо[1,2-с]піримідин-5(3H)-они, гетероциклізація, противірусна активність.

У наш час, завдяки розумінню механізмів багатьох біологічних процесів, боротьба зі збудниками захворювань здійснюється на молекулярному рівні. Мікроорганізми та бактеріальні клітини, як складні біологічні системи, мають чимало “вразливих” мішеней, на які можна спрямувати дію лікарського засобу; тому цитотоксичність притаманна дуже різноманітним за будовою молекулам. Але арсенал боротьби з вірусними захворюваннями значно менший, і один із можливих варіантів пов’язаний із використанням речовин, здатних до взаємодії безпосередньо з РНК чи ДНК вірусу. Даний тип противірусних препаратів представлено, зокрема, похідними пуринів та піримідинів (рисунок); варіативність таких сполук забезпечується шляхом введення в базову гетероциклічну структуру нових замісників чи функціональних груп.

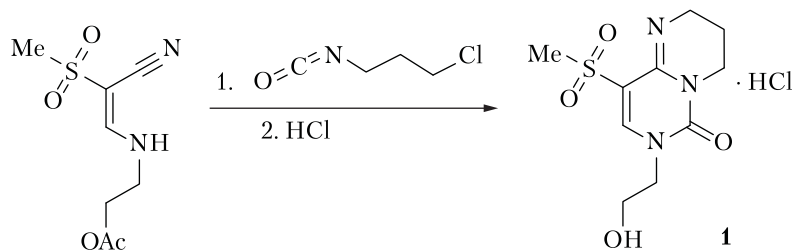
Ми ставили за мету створення нових похідних піримідину із фармакофорним метилсульфононим угрупованням. Цей фрагмент присутній у складі багатьох біоактивних молекул [1], у тому числі — в природних сполуках [2].

У попередніх дослідженнях була отримана сульфонова похідна **1** (схема 1) — функціоналізований аналог цитозину та перший приклад 2,3,4,7-тетрагідро-6H-піримідо[1,6-a]піримідин-6-ону з метилсульфонільною групою в положенні 9 [3].

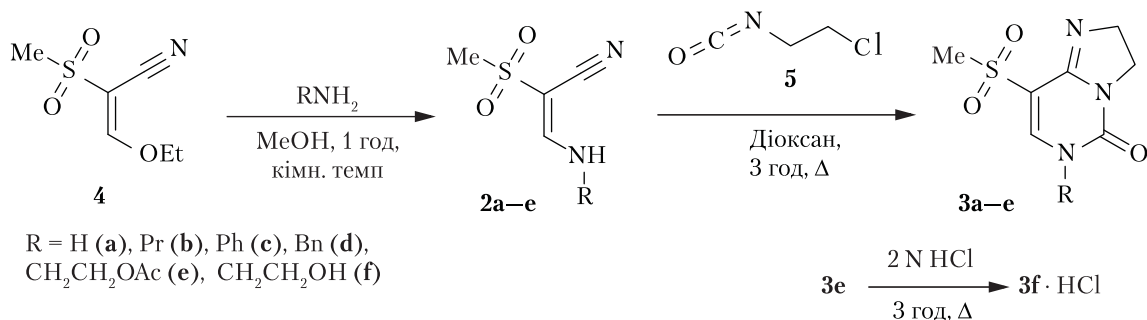
© Р.М. Соломянний, В.С. Броварець, О.В. Шабликінa, В.С. Москвіна, В.П. Хиля, 2019



З метою створення нових потенційних противірусних засобів на основі гетерилсульфонів ми модифікували запропоновану нами раніше синтетичну послідовність, зображену на *схемі 1*, шляхом заміни 1-ізоціанато-3-хлоропропану аналогічною похідною етану. Це дало нам можливість вперше отримати 2,6-дигідроїмідазо[1,2-с]піримідин-5(3*H*)-они **3a–e** з метилсульфонільною групою в положенні 8, застосовуючи як вихідні сполуки 3-аміно-2-(метилсульфоніл)акрилонітрил (**2a**) та *N*-заміщені 3-аміно-2-(метилсульфоніл)акрилонітрили **2b–e** (*схема 2*). Варто зазначити, що серед небагатьох відомих 2,6-дигідроїмідазо[1,2-с]піримідин-5(3*H*)-онів знайдено сполуки, які мають противірусну активність [4], та речовини, що є флуоресцентними зондами для дослідження *D*-гліцеральдегід-3-фосфат-дегідрогенази [5]; також нуклеозиди на основі подібних аналогів цитозину було включено в олігомерну ДНК [6].



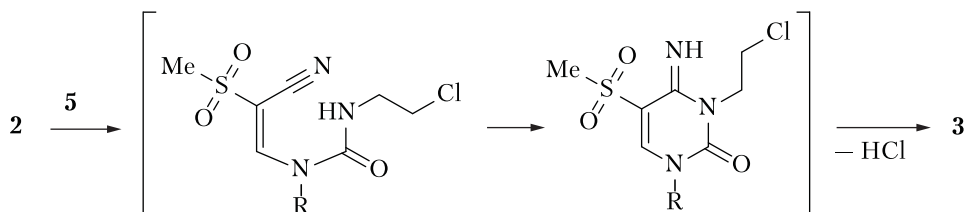
*Схема 1*



*Схема 2*

Синтез аміноакрилонітрилів **2a–e**, необхідних для наступного перетворення в цільові гетероциклічні похідні, відбувався шляхом нуклеофільного заміщення залишком амі-

ну етоксигрупи вихідного сульфонілакрилонітрилу **4** [3, 7]; дана реакція проходить досить швидко та в м'яких умовах і надає широкі можливості для варіювання замісника R (див. *схему 2*). Варто відзначити, що подальша гетероциклізація за участю 1-ізоціанато-2-хлоретану **5** має характер доміно-процесу, який розпочинається з ацилювання ізоціанатною групою фрагмента NH у складі акрилонітрилу, після чого відбувається нуклеофільна атака атомом нітрогену атома карбону нітрильної групи, що завершується N-алкілюванням новоствореної іміногрупи (*схема 3*).



*Схема 3*

Гідроліз естерного залишку у складі похідної **3e** було проведено в концентрованій соляній кислоті, тому сполука **3f** вилучена у вигляді гідрохлориду (див. *схему 2*). Будова синтезованих гетерилсульфонів **3** підтверджена даними  $^1\text{H}$  та  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектроскопії, хромато-мас-спектрометрії (наведені в експериментальній частині), а також рентгеноструктурним аналізом похідної **3b**.

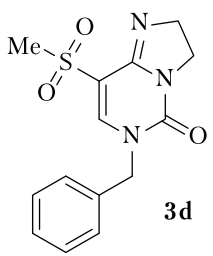
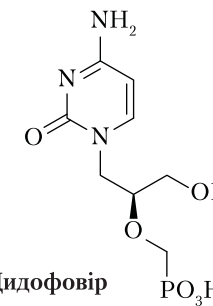
Випробування синтезованих речовин **3** на наявність протівірусної активності проведені на лінії клітин HFF, вражених вірусом герпесу (Herpes simplex virus 1, штам E-377) та ВК вірусом (штам Gardner), в Department of Pediatrics, University of Alabama at Birmingham, а також на лінії клітин Huh<sub>7</sub>, вражених вірусом лихоманки денге (Dengue virus 2, штам New Guinea C), в Institute for Antiviral Research, Utah State University. Результати даних випробувань свідчать про високу активність похідної **3d** щодо ВК вірусу (один із поліомавірусів). Кількісні параметри протівірусної активності речовини **3d** мають порядок показників препарату порівняння “Цидофовір” (таблиця); а за співвідношенням  $\text{SI}_{90}$  сполука **3d** навіть значно перевершує діючий лікарський засіб.

Таким чином, нами розроблено зручний метод синтезу нових похідних сульфонів ряду дигідроімідазопіримідинону, що базується на доступних реагентах та дає можливості для варіації замісників у базовому гетероциклі. Висока протівірусна активність (щодо ВК вірусу) однієї із синтезованих речовин — 8-(метилсульфоніл)-6-бензил-2,6-дигідроімідазо[1,2-с]-піримідин-5(3Н)-ону — є переконливим аргументом для продовження досліджень в цьому напрямку.

**Експериментальна частина.** Контроль за проходженням реакції та чистотою одержаних продуктів здійснювався методом тонкошарової хроматографії на платівках 60 F<sub>254</sub> Merck. Дані елементного аналізу відповідають розрахованим. Температуру топлення визначено на установці Фішера–Джонса.

Спектри  $^1\text{H}$  та  $^{13}\text{C}$  ЯМР виміряні на приладі Varian Unityplus 400 (робоча частота відповідно 400 та 100 МГц, внутрішній стандарт — ТМС). Дані хромато-мас-спектрометрії отримано на вискоелективному рідинному хроматографі Agilent 1100 Series, обладнаному діодною матрицею з мас-селективним детектором Agilent LC\MSD SL, метод іонізації — хімічна іонізація при атмосферному тиску (APCI).

Дані противірусної активності сполуки **3d** щодо ВК вірусу порівняно з препаратом “Цидофовір”

Сполука	EC <sub>50</sub> , мкмоль/л	EC <sub>90</sub> , мкмоль/л	CC <sub>50</sub> , мкмоль/л	SI <sub>50</sub>	SI <sub>90</sub>
 <p><b>3d</b></p>	0,66	1,03	>150,00	>229	>146
 <p><b>Цидофовір</b></p>	0,24	9,53	>150,00	>600	>16

Примітка. EC<sub>50</sub> – концентрація, яка викликає зменшення реплікації вірусів на 50 %; EC<sub>90</sub> – концентрація, яка викликає зменшення реплікації вірусів на 90 %; CC<sub>50</sub> – концентрація, за якої виживають 50 % клітин; SI<sub>50</sub> – CC<sub>50</sub>/EC<sub>50</sub>; SI<sub>90</sub> – CC<sub>50</sub>/EC<sub>90</sub>

3-Аміно-2-(метилсульфоніл)акрилонітрил (**2a**), 2-(метилсульфоніл)-3-(пропіламіно)-акрилонітрил (**2b**), 2-(метилсульфоніл)-3-(феніламіно)акрилонітрил (**2c**), 3-(бензиламіно)-2-(метилсульфоніл)акрилонітрил (**2d**) та 2-{{2-ціано-2-(метилсульфоніл)вініл}аміно}етил-ацетат (**2e**) отримані за методикою, описаною в роботі [3]; фізичні характеристики сполуки **2a** наведені в [8], сполуки **2e** – в [3]. Методика синтезу та фізичні характеристики 3-етокси-2-(метилсульфоніл)акрилонітрилу (**4**) описані в [9].

**Загальна методика синтезу 8-(метилсульфоніл)-6-R-2,6-дигідрімідазо[1,2-с]піримідин-5(3H)-онів (3).** До розчину 2,15 ммоль аміноакрилонітрилу **5** в 5 мл абсолютного діоксану додають послідовно 0,27 г (2,26 ммоль) 3-ізоціанато-1-хлоретану (**4**) та 0,4 мл (2,29 ммоль) Et<sub>3</sub>N. Реакційну суміш кип'ятять при перемішуванні 2 год, після чого охолоджують до кімнатної температури та відфільтровують осад Et<sub>3</sub>N·HCl. Фільтрат упарюють за умов пониженого тиску, залишок перекристалізують із етилового спирту.

8-(Метилсульфоніл)-2,6-дигідрімідазо[1,2-с]піримідин-5(3H)-он (**3a**). Вихід 89 %. Т. топл. 283–285 °С. <sup>1</sup>H ЯМР (400 МГц, ДМСО-*d*<sub>6</sub>), δ, м.ч.: 3,14 (3H, с, CH<sub>3</sub>SO<sub>2</sub>), 3,80 (2H, т, J = 8,2, CH<sub>2</sub>-2), 3,95 (2H, т, J = 8,2, CH<sub>2</sub>-3), 8,09 (1H, с, Н-7), 9,05 (1H, уш. с, NH). LCMS, *m/z*: 216 [M+1]<sup>+</sup>.

8-(Метилсульфоніл)-6-пропіл-2,6-дигідрімідазо[1,2-с]піримідин-5(3H)-он (**3b**). Вихід 92 %. Т. топл. 152–154 °С. <sup>1</sup>H ЯМР (400 МГц, ДМСО-*d*<sub>6</sub>), δ, м.ч. (J, Гц): 0,86 (3H, т, J = 5,6, NCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>), 1,59 (2H, секст, J = 5,6, NCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>), 3,22 (3H, с, CH<sub>3</sub>SO<sub>2</sub>), 3,70 (2H, т, J = 5,6, NCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>), 3,78 (2H, т, J = 8,0, CH<sub>2</sub>-2), 3,93 (2H, т, J = 8,0, CH<sub>2</sub>-3), 8,01 (1H, с,



H-7).  $^{13}\text{C}$  ЯМР (100 МГц, ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м.ч.: 11,1, 22,5, 42,2, 44,2, 50,1, 54,1, 108,8, 147,2, 148,2, 149,2. LCMS,  $m/z$ : 258  $[\text{M}+1]^+$ .

8-(Метилсульфоніл)-6-феніл-2,6-дигідромідазо[1,2-с]піримідин-5(3Н)-он (**3c**). Вихід 84 %. Т. топл. 189–191 °С.  $^1\text{H}$  ЯМР (400 МГц, ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м.ч. ( $J$ , Гц): 3,26 (3H, с,  $\text{CH}_3\text{SO}_2$ ), 3,84 (2H, т,  $J = 8,0$ ,  $\text{CH}_2$ -2), 4,00 (2H, т,  $J = 8,0$ ,  $\text{CH}_2$ -3), 7,40–7,55 (5H, м, Ph-6), 7,72 (1H, с, H-7).  $^{13}\text{C}$  ЯМР (100 МГц, ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м.ч.: 42,3, 44,3, 54,3, 110,0, 127,4 $\times$ 2, 129,2, 129,8 $\times$ 2, 140,0, 146,7, 147,5, 149,0. LCMS,  $m/z$ : 292  $[\text{M}+1]^+$ .

8-(Метилсульфоніл)-6-бензил-2,6-дигідромідазо[1,2-с]піримідин-5(3Н)-он (**3d**). Вихід 86 %. Т. топл. 203–205 °С.  $^1\text{H}$  ЯМР (400 МГц, ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м.ч. ( $J$ , Гц): 3,21 (3H, с,  $\text{CH}_3\text{SO}_2$ ), 3,79 (2H, т,  $J = 8,0$ ,  $\text{CH}_2$ -2), 3,93 (2H, т,  $J = 8,0$ ,  $\text{CH}_2$ -3), 4,96 (2H, с,  $\text{CH}_2\text{Ph}$ ), 7,35 (5H, уш. с, Ph-6), 8,09 (1H, с, H-7).  $^{13}\text{C}$  ЯМР (100 МГц, ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м.ч.: 42,2, 44,2, 51,2, 54,2, 109,6, 128,1 $\times$ 2, 128,3, 129,6 $\times$ 2, 137,1, 146,9, 148,2, 149,1. LCMS,  $m/z$ : 306  $[\text{M}+1]^+$ .

2-[8-(Метилсульфоніл)-5-оксо-2,3-дигідромідазо[1,2-с]піримідин-6(5Н)-іл]-етилацетат (**3e**). Вихід 92 %. Т. топл. 146–147 °С.  $^1\text{H}$  ЯМР (400 МГц, ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м.ч.: 2,00 (3H, с,  $\text{CH}_3\text{CO}_2$ ), 3,20 (3H, с,  $\text{CH}_3\text{SO}_2$ ), 3,78 (2H, т,  $J = 8,0$ ,  $\text{CH}_2$ -2), 3,93 (2H, т,  $J = 8,0$ ,  $\text{CH}_2$ -3), 4,00 (2H, уш. с,  $\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{OAc}$ ), 4,20 (2H, уш. с,  $\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{OAc}$ ), 7,96 (1H, с, H-7).  $^{13}\text{C}$  ЯМР (100 МГц, ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м.ч.: 21,1, 42,3, 44,1, 47,4, 54,1, 62,0, 109,1, 147,5, 148,1, 149,0, 170,6. LCMS,  $m/z$ : 302  $[\text{M}+1]^+$ .

6-(2-Гідроксіетил)-8-(метилсульфоніл)-2,6-дигідромідазо[1,2-с]піримідин-5(3Н)-ону гідрохлорид (**3f**). До сухого залишку неочищеної речовини **3e**, отриманого за попередньою метою, додають 15 мл 2 N HCl. Отриману суміш кип'ятять впродовж 3 год, після чого упарюють за умов пониженого тиску. Залишок обробляють ізопропіловим спиртом (10–15 мл), у результаті чого формується кристалічний осад, який відфільтровують та промивають холодним ізопропіловим спиртом, отримуючи таким чином спектрально чистий продукт.

Вихід 83 % (за двома стадіями). Т. топл. 270 °С (субл.).  $^1\text{H}$  ЯМР (400 МГц,  $\text{D}_2\text{O}$ ),  $\delta$ , м.ч.: 3,22 (3H, с,  $\text{CH}_3\text{SO}_2$ ), 3,75 (2H, т,  $J = 5,2$ ,  $\text{CH}_2$ -2), 4,04 (2H, т,  $J = 5,2$ ,  $\text{CH}_2$ -3), 4,09 (2H, т,  $J = 8,0$ ,  $\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ ), 4,26 (2H, т,  $J = 8,0$ ,  $\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ ), 8,63 (1H, с, H-7); встановити положення групи OH внаслідок обмінних процесів не вдалося.  $^{13}\text{C}$  ЯМР (100 МГц,  $\text{D}_2\text{O}$ ),  $\delta$ , м.ч.: 42,0, 45,0, 45,1, 52,9, 58,4, 103,5, 146,6, 155,3, 156,3. LCMS,  $m/z$ : 260  $[\text{M}+1]^+$ .

Дослідження протівірусної активності здійснено згідно з контрактом HHSN2722011000191 з Virology Branch DMID, NIAID, NIH (USA). Автори висловлюють вдячність компанії «Енамін» за фінансову підтримку даної роботи.

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Straub A., Stasch J.P., Alonso-Alija C., Benet-Buchholz J., Ducke B., Feurer A., Fürstner C. NO-Independent stimulators of soluble guanylate cyclase. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2001. **11**, Iss. 6. P. 781–784. doi: [https://doi.org/10.1016/S0960-894X\(01\)00073-7](https://doi.org/10.1016/S0960-894X(01)00073-7)
2. Семенов А.А., Карцев В.Г. Основы химии природных соединений. Т. 2. Москва: ICSPF, 2009. 420 с.
3. Brovarets V., Solomyannyi R., Slivchuk S., Zhirnov V., Rusanov E., Smee D., Choi J. *In vitro* activity of the novel pyrimidines and their condensed derivatives against poliovirus. *Curr. Bioact. Compd.* 2018. **14**, Iss. 9. P. 1–9. doi: <https://doi.org/10.2174/1573407214666180720120509>
4. Kifli N., De Clercq E., Balzarini J., Simons C. Novel imidazo[1,2-с]pyrimidine base-modified nucleosides: synthesis and antiviral evaluation. *Bioorg. Med. Chem.* 2004. **12**, Iss. 15. P. 4245–4252. doi: <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2004.05.017>

5. Ермолин С.В., Кост А.А., Иванов М.В., Наградова Н.К. Этенпроизводные цитозина как флуоресцентные зонды при исследовании D-глицеральдегид-3-фосфатдегидрогеназы. *Докл. АН СССР*. 1978. **238**, вып. 1. С. 245–248.
6. Zhang W., Rieger R., Iden C., Johnson F. Synthesis of 3,N4-etheno, 3,N4-ethano, and 3-(2-hydroxyethyl) derivatives of 2'-deoxycytidine and their incorporation into oligomeric DNA. *Chem. Res. Toxicol.* 1995. **8**, Iss. 1. P. 148–156. doi: <https://doi.org/10.1021/tx00043a020>
7. Сливчук С.Р., Броварець В.С., Драч Б.С. Зручний синтез похідних урацилу та цитозину з арилсульфонільними залишками біля центра С5. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2006. № 3. С. 146–152.
8. Pigošová J., Gatíal A., Milata V., Černuchová P., Prónayová N., Liptaj T., Matějka P. The isomers and conformers of some push-pull-enamines studied by vibrational and NMR spectroscopy and by *ab initio* calculations. *J. Mol. Struct.* 2005. **744**. P. 315–324. doi: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2004.10.053>
9. Lunt E., Newton C.G., Smith C., Stevens G.P., Stevens M.F.G., Straw C.G., Walsh R.J.A., Warren P.J., Fizames C., Lavelle F., Langdon S.P., Vickers L.M. Antitumor imidazotetrazines. 14. Synthesis and antitumor activity of 6- and 8-substituted imidazo[5,1-*d*]-1,2,3,5-tetrazinones and 8-substituted pyrazolo[5,1-*d*]-1,2,3,5-tetrazinones. *J. Med. Chem.* 1987. **30**, Iss. 2. P. 357–366. doi: <https://doi.org/10.1021/jm00385a018>

Надійшло до редакції 22.02.2019

## REFERENCES

1. Straub, A., Stasch, J. P., Alonso-Alija, C., Benet-Buchholz, J., Ducke, B., Feurer, A. & Fürstner, C. (2001). NO-Independent stimulators of soluble guanylate cyclase. *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 11, Iss. 6, pp. 781-784. doi: [https://doi.org/10.1016/S0960-894X\(01\)00073-7](https://doi.org/10.1016/S0960-894X(01)00073-7)
2. Semenov, A. A., Kartsev, V. G. (2009). Foundations of the chemistry of natural compounds. Vol. 2. Moscow: ICSPF (in Russian).
3. Brovarets, V., Solomyannyi, R., Slivchuk, S., Zhirnov, V., Rusanov, E., Smee, D. & Choi, J. (2018). *In vitro* activity of the novel pyrimidines and their condensed derivatives against poliovirus. *Curr. Bioact. Compd.*, 14, Iss. 9, pp. 1-9. doi: <https://doi.org/10.2174/1573407214666180720120509>
4. Kifli, N., De Clercq, E., Balzarini, J. & Simons, C. (2004). Novel imidazo[1,2-*c*]pyrimidine base-modified nucleosides: synthesis and antiviral evaluation. *Bioorg. Med. Chem.*, 12, Iss. 15, pp. 4245-4252. doi: <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2004.05.017>
5. Ermolin, S. V., Kost, A. A., Ivanov, M. V. & Nagradova, N. K. (1978). Ethylene derivatives of cytosine as fluorescent probes in the study of D-glyceraldehyde-3-phosphate dehydrogenase. *Dokl. AN SSSR*, 238, Iss. 1, pp. 245-248 (in Russian).
6. Zhang, W., Rieger, R., Iden, C. & Johnson, F. (1995). Synthesis of 3,N4-etheno, 3,N4-ethano, and 3-(2-hydroxyethyl) derivatives of 2'-deoxycytidine and their incorporation into oligomeric DNA. *Chem. Res. Toxicol.*, 8, Iss. 1, pp. 148-156. doi: <https://doi.org/10.1021/tx00043a020>
7. Slivchuk, S. R., Brovarets, V. S. & Drach, B.S. (2006). Convenient synthesis of uracil and cytosine derivatives with arylsulfonyl residues near the center of C5. *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.*, No. 3, pp. 146-152 (in Ukrainian).
8. Pigošová, J., Gatíal, A., Milata, V., Černuchová, P., Prónayová, N., Liptaj, T. & Matějka, P. (2005). The isomers and conformers of some push-pull-enamines studied by vibrational and NMR spectroscopy and by *ab initio* calculations. *J. Mol. Struct.*, 744, pp. 315-324. doi: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2004.10.053>
9. Lunt, E., Newton, C. G., Smith, C., Stevens, G. P., Stevens, M. F. G., Straw, C. G., Walsh, R. J. A., Warren, P. J., Fizames, C., Lavelle, F., Langdon, S. P. & Vickers, L. M. (1987). Antitumor imidazotetrazines. 14. Synthesis and antitumor activity of 6- and 8-substituted imidazo[5,1-*d*]-1,2,3,5-tetrazinones and 8-substituted pyrazolo[5,1-*d*]-1,2,3,5-tetrazinones. *J. Med. Chem.*, 30, Iss. 2, pp. 357-366. doi: <https://doi.org/10.1021/jm00385a018>

Received 22.02.2019



Р.Н. Соломяный<sup>1</sup>, В.С. Броварец<sup>1</sup>, О.В. Шаблыкينا<sup>1,2</sup>, В.С. Москвина<sup>1,2</sup>, В.П. Хуля<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт биоорганической химии и нефтехимии им. В.П. Кухаря НАН Украины, Киев

<sup>2</sup> Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко

E-mail: shablykina@ukr.net

8-(МЕТИЛСУЛЬФОНИЛ)-2,6-ДИГИДРОИМИДАЗО[1,2-С]ПИРИМИДИН-5(3H)-ОНЫ —  
НОВЫЕ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ СУЛЬФОНОВ  
С АНТИВИРУСНОЙ АКТИВНОСТЬЮ

Путем взаимодействия 3-(R-амино)-2-(метилсульфонил)акрилонитрила и 1-изоцианат-2-хлорэтана получены новые сульфоновые аналоги цитозина — 8-(метилсульфонил)-6-R-2,6-дигидроимидазо[1,2-с]пиримидин-5(3H)-оны. Доказана противовирусная активность 8-(метилсульфонил)-6-бензил-2,6-дигидроимидазо[1,2-с]пиримидин-5(3H)-она.

**Ключевые слова:** 3-амино-2-(метилсульфонил)акрилонитрилы, 8-(метилсульфонил)-2,6-дигидроимидазо[1,2-с]пиримидин-5(3H)-оны, гетероциклизация, противовирусная активность.

R.M. Solomyannyi<sup>1</sup>, V.S. Brovarets<sup>1</sup>, O.V. Shablykina<sup>1,2</sup>, V.S. Moskvina<sup>1,2</sup>, V.P. Khilya<sup>2</sup>

<sup>1</sup> V.P. Kukhar Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry of the NAS of Ukraine, Kiev,

<sup>2</sup> Taras Shevchenko National University of Kiev

E-mail: shablykina@ukr.net

8-(METHYLSULFONYL)-2,6-DIHYDROIMIDAZO[1,2-C]PYRIMIDINE-5(3H)-ONES —  
NEW HETEROCYCLIC DERIVATIVES OF SULFONES WITH ANTIVIRAL ACTIVITY

By the interaction of 3-(R-amino)-2-(methylsulfonyl)acrylonitrile and 1-isocyanate-2-chloroethane, new sulfone analogues of cytosine, 8-(methylsulfonyl)-6-R-2,6-dihydroimidazo[1,2-c]pyrimidine-5(3H)-ones, are synthesized. The antiviral activity of 8-(methylsulfonyl)-6-benzyl-2,6-dihydroimidazo[1,2-c]pyrimidine-5(3H)-one has been proven.

**Keywords:** 3-amino-2-(methylsulfonyl)acrylonitrile, 8-(methylsulfonyl)-2,6-dihydroimidazo[1,2-c]pyrimidine-5(3H)-one, heterocyclization, antiviral activity.

---

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.05.082>

УДК 544.72:547.24:544.032.7

**В.В. Туров, И.И. Геращенко, Т.В. Крупская, Е.А. Степанюк**

Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко НАН Украины, Киев

E-mail: krupska@ukr.net

## **Особенности формирования композитной системы полиметилсилоксан/кремнезем/вода в присутствии поверхностно активного вещества—декаметоксина**

*Представлено членом-корреспондентом НАН Украины В.В. Туровым*

*Методом низкотемпературной  $^1\text{H}$  ЯМР спектроскопии изучено связывание воды в гидратированных порошках полиметилсилоксана (ПМС), кремнезема и композитной системе ПМС/ $\text{SiO}_2$ /декаметоксин/ $\text{H}_2\text{O}$ . Показано, что при заполнении межчастичных зазоров ПМС способом гидроуплотнения межфазная энергия воды в межчастичных зазорах гидрофобного ПМС при одинаковой гидратированности вдвое превосходит межфазную энергию воды в гидрофильном кремнеземе. В композитной системе ПМС/ $\text{SiO}_2$ /декаметоксин/ $\text{H}_2\text{O}$  происходит неаддитивный рост энергии связывания воды, который, вероятно, обусловлен формированием под влиянием механической нагрузки в присутствии воды микрогетерогенных участков, состоящих преимущественно из гидрофобной и гидрофильной компонент. Таким образом, с помощью механических нагрузок, а также путем добавления поверхностно активного вещества, можно управлять адсорбционными и гидратными свойствами композитных систем.*

**Ключевые слова:** полиметилсилоксан, гидрофильный диоксид кремния, метилкремнезем, декаметоксин.

Новые полифункциональные адсорбенты, в том числе медицинского назначения, могут быть созданы на основе смесей гидрофобного и гидрофильного кремнеземов. При этом разнородные составляющие композитной системы сорбируют разные типы веществ, что существенно расширяет область их применения. Однако возникают трудности перевода гидрофобных компонент в водную среду. Этот процесс может осуществляться путем их предварительного смачивания органическими растворителями (в последующем удаляемых путем декантации) [1] или гидроуплотнения гидрофобного порошка совместно с жидкой водой, количество которой должно быть достаточным для заполнения межчастичных зазоров [2–5]. Уже первые эксперименты по сопоставлению влияния на граничные слои воды пирогенного кремнезема и его метилированного аналога (метилкремнезема) [1] показали, что гидрофобизация поверхности кремнезема может приводить не к уменьшению, а к росту величины энергии связывания воды с поверхностью. Эти результаты подтверждаются данными работы [2], в которой описан простой способ перевода гидрофобных порошков в водную среду путем их перетирания с водой в фарфоровой ступке. Показано, что во влаж-

© В.В. Туров, И.И. Геращенко, Т.В. Крупская, Е.А. Степанюк, 2019

ных порошках гидрофобного и гидрофильного кремнезема, содержащих равное по массе количество воды, фиксируются близкие по величине значения межфазной энергии воды.

Полиметилсилоксановые адсорбенты — гидро- или ксерогели метилкремниевой кислоты, синтезируют из метилтрихлорсилана [6–8]. На первой стадии в реакции с водой образуется непористый полиметилсилоксан, который затем растворяют в растворе щелочи (NaOH или KOH). При этом образуется метилсиликонат натрия (или калия), который после добавления необходимого для нейтрализации щелочи количества кислоты (HCl или H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) превращается в гель метилкремниевой кислоты. Этот гель отмывают водой от остатков кислоты и соли, после чего его можно использовать в качестве энтеросорбента как в гелеобразном, так и в высушенном состоянии [9, 10]. Дополнительным фактором воздействия на гетерогенную гидрофобно-гидрофильную систему может служить механическое воздействие и присутствие поверхностно активных веществ.

Целью исследования было определение строения гидратного слоя в ксерогеле полиметилсилоксана (ПМС) в условиях высокой гидратированности поверхности и влияния на параметры связывания воды присутствия гидрофильного кремнезема и поверхностно активного вещества — декаметоксина (ДМТ), а также гидрофобной среды (CDCl<sub>3</sub>). Связывание воды изучалось с помощью метода низкотемпературной <sup>1</sup>H ЯМР спектроскопии, которая позволяет по величине химического сдвига воды судить об упорядоченности сетки водородных связей межфазной воды, а по депрессии температуры замерзания рассчитывать термодинамические характеристики связанной воды и распределения по радиусам кластеров воды, локализованной в межчастичных зазорах ксерогеля ПМС [11, 12].

**Экспериментальная часть.** В качестве исходного материала использовали 6 % гель метилкремниевой кислоты (“Креомафарм”, Украина), реализуемый в торговой сети в качестве энтеросорбента для лечения расстройств пищеварительной системы. После высушивания при комнатной температуре содержание воды в сухом ПМС составляло менее 1 % массы сухого вещества. Перевод в водную среду осуществляли путем растирания порошка ПМС с равным по массе количеством дистиллированной воды в фарфоровой ступке до формирования однородного композита ПМС/вода, насыпная плотность ( $C_d$ ) которого во влажном состоянии составляла 500 мг/см<sup>3</sup>. Пирогенный кремнезем марки А-300 (Калушский опытно-экспериментальный завод) имел удельную поверхность по БЭТ ( $S_{БЭТ}$ ) 295 м<sup>2</sup>/г и насыпную плотность 60 мг/см<sup>3</sup>. Для приготовления композитной системы ПМС/SiO<sub>2</sub>/ДМТ сухие ингредиенты брали в соотношении 30/68/2, а для системы ПМС/ДМТ — 30/2. Их тщательно растирали в фарфоровой ступке до формирования однородной смеси. Увлажнение образца проводили путем добавления к сухому порошку ПМС или композиту равного по массе количества дистиллированной воды. Затем образец растирали в фарфоровой ступке в течение 10 мин. При этом происходило гидроуплотнение материала и его насыпная плотность составляла 200–300 мг/см<sup>3</sup>. Предполагалось, что под влиянием механической нагрузки в образце смогут формироваться микрогетерогенные участки, состоящие преимущественно из гидрофобных или гидрофильных компонентов. Количество воды для всех изученных систем было одинаковым ( $C_{H_2O} = 1000$  мг/г) и достаточным для заполнения основной части межчастичных зазоров.

Спектры ЯМР получали на ЯМР спектрометре высокого разрешения (Varian “Mercury”) с рабочей частотой 400 МГц. Использовали 90° зондирующий импульс длительностью

3 мкс. Температура в датчике регулировалась термopриставкой Bruker VT-1000 с точностью  $\pm 1$  град. Интенсивности сигналов определяли путем измерения площади пиков с использованием процедуры разложения сигнала на его составляющие в предположении гауссовской формы линии, оптимизации нулевой линии и фазы с точностью, которая для хорошо разрешенных сигналов была не ниже  $\pm 5$  %. Для предотвращения переохлаждения воды в исследуемых объектах концентрацию незамерзающей воды измеряли при нагревании образцов, предварительно охлажденных до температуры 210 К. Методика ЯМР-измерений, определения термодинамических характеристик и расчета радиуса кластеров межфазной воды подробно описана в [11, 12].

**Результаты и их обсуждение.** Снятые при разных температурах спектры  $^1\text{H}$  ЯМР воды в изученных системах на воздухе приведены на рис. 1.

С понижением температуры интенсивность сигнала воды уменьшается ввиду частичного замерзания воды в межчастичных зазорах. Тогда, зная общее количество воды в образцах ( $C_{\text{H}_2\text{O}} = 1000$  мг/г), по интегральному значению интенсивности сигнала воды можно для каждой температуры ( $I_T$ ) определить концентрацию незамерзающей воды ( $C_{\text{uw}} = (I_T/I_{280}) \cdot 1000$ ) и построить зависимости  $C_{\text{uw}}(T)$ . Процесс замерзания (таяния) межфазной воды, локализованной в твердой пористой матрице, проходит в соответствии с изменениями свободной энергии Гиббса, обусловленными влиянием поверхности. Оно тем меньше, чем дальше от поверхности изучаемый слой воды. При  $T = 273$  К замерзает вода, свойства которой не отличаются от объемных, а по мере понижения температуры (без учета эффекта переохлаждения) замерзают слои воды, все ближе расположенные к поверхности, причем для межфазной воды справедливо соотношение

$$\Delta G_{\text{ice}} = -0,036(273,15 - T), \quad (1)$$

где численный коэффициент представляет собой параметр, связанный с температурным коэффициентом изменения свободной энергии Гиббса для льда [13].

Межфазная энергия твердых тел или биополимеров определялась как модуль суммарного понижения свободной энергии абсорбированной воды, обусловленного наличием внутренней границы раздела фаз вода—полимер по формуле

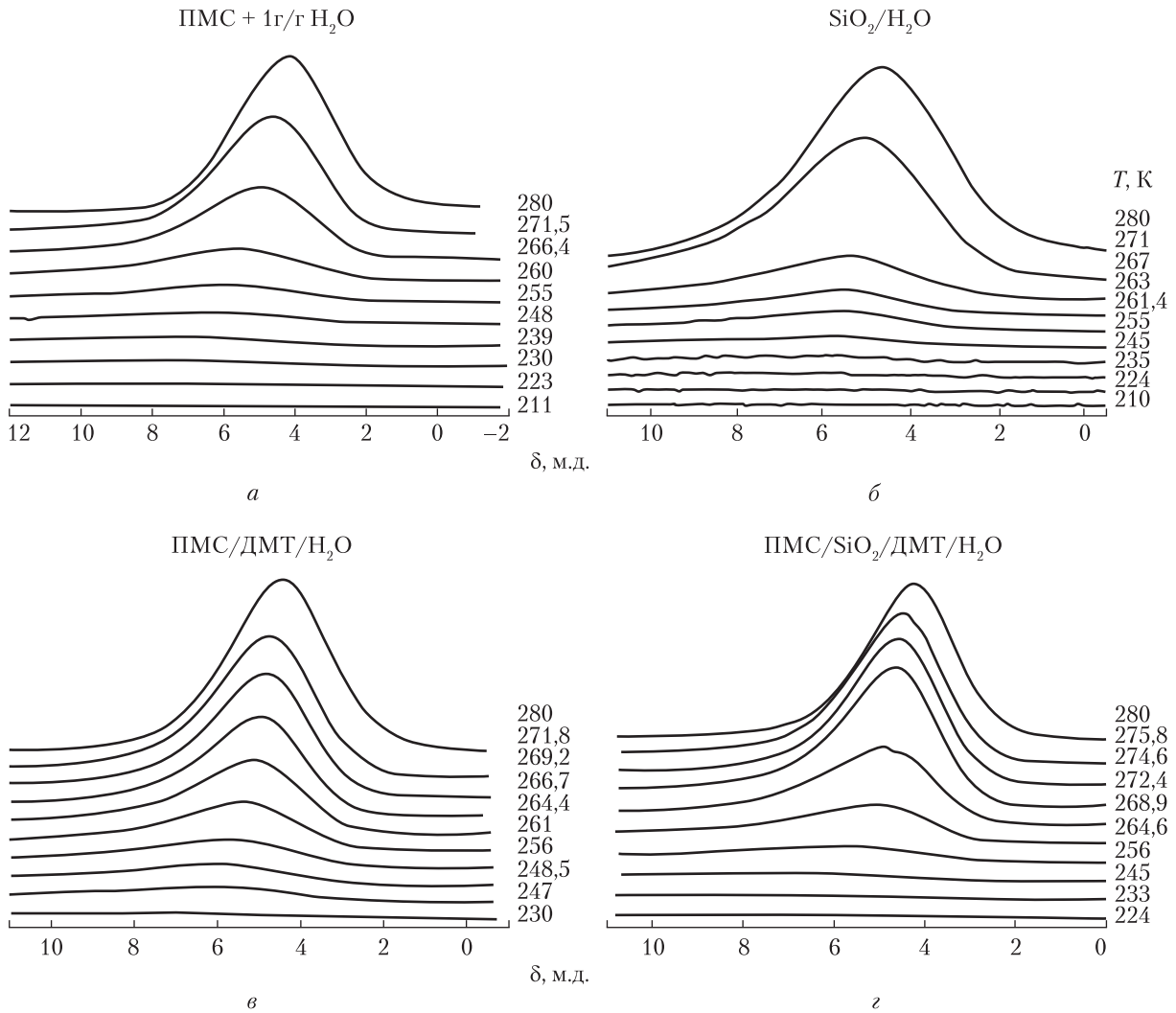
$$\gamma_S = -K \int_0^{C_{\text{uw}}^{\text{max}}} \Delta G(C_{\text{uw}}) dC_{\text{uw}}, \quad (2)$$

где  $C_{\text{uw}}^{\text{max}}$  — общее количество незамерзающей воды при  $T = 273$  К.

Величина межфазной энергии является удобным параметром, который позволяет сравнивать энергию связывания воды в разных системах, особенно если количество воды в них одинаковое.

При этом для определения геометрических размеров ограниченных твердой поверхностью наноразмерных агрегатов жидкости может быть использовано уравнение Гиббса—Томсона [14, 15], связывающее радиус сферических или цилиндрических пор ( $R$ ) с величиной депрессии температуры замерзания:

$$\Delta T_m = T_m(R) - T_{m,\infty} = \frac{2\sigma_{sl}T_{m,\infty}}{\Delta H_f \rho R}, \quad (3)$$

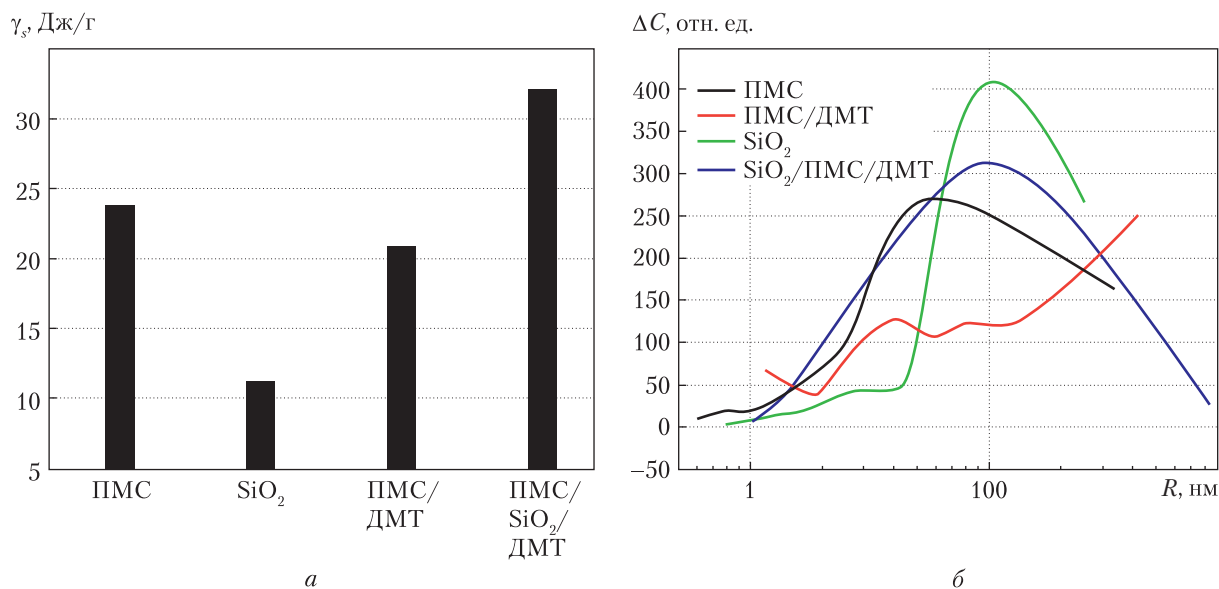


**Рис. 1.** Снятые при разных температурах спектры <sup>1</sup>H ЯМР воды в гидратированных порошках ПМС (а), кремнезема SiO<sub>2</sub> (б) и композитных системах на их основе (в, г) в воздушной среде

где  $T_m(R)$  – температура плавления льда, локализованного в порах радиуса  $R$ ;  $T_{m,\infty}$  – температура плавления объемного льда;  $\rho$  – плотность твердой фазы;  $\sigma_{sl}$  – энергия взаимодействия твердого тела с жидкостью;  $\Delta H_f$  – объемная энтальпия плавления. В случае, когда вода заполняет все межчастичное пространство, формула (3) позволяет определять распределение по радиусам межчастичных зазоров.

На рис. 2 приведена диаграмма изменения межфазной энергии воды в зависимости от варьирования состава композитной системы (а) и распределения по радиусам кластеров воды, локализованной в межчастичных зазорах (б).

В соответствии с приведенными данными, суммарная энергия связывания воды в гидратированном порошке гидрофобного ПМС более чем вдвое превосходит энергию связывания воды в гидрофильном кремнеземе (см. рис. 2, а). Поскольку удельная поверхность ПМС может достигать 500 м<sup>2</sup>/г, можно сделать вывод, что связывание воды определяется в первую очередь



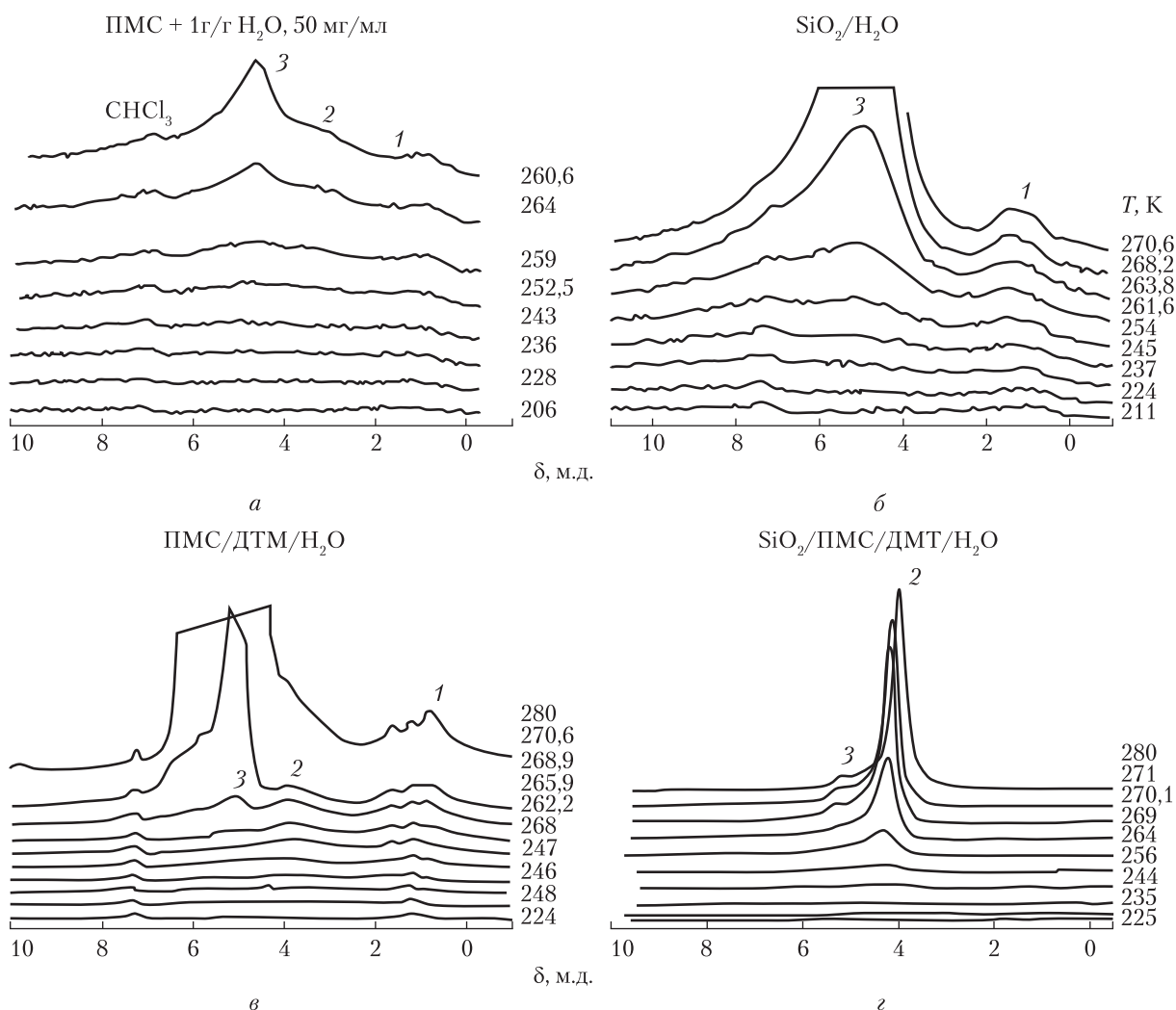
**Рис. 2.** Диаграмма изменения межфазной энергии воды в зависимости от состава композитной системы (а) и распределения по радиусам кластеров адсорбированной воды (б) в воздушной среде

не гидрофобными свойствами поверхности, а морфологией внутреннего межчастичного пространства (см. рис. 2, б). Максимум на кривой распределения по радиусам заполненных водой пор (межчастичных зазоров) в ПМС составляет  $R = 4$  нм (см. рис. 2, б), что значительно меньше, чем в кремнеземе ( $R = 10$  нм), а это приводит к большим значениям межфазной энергии.

Добавление к ПМС небольшого количества (2 % (мас.)) поверхностно активного вещества (ДМТ) приводит к существенному изменению морфологии межчастичного пространства. На кривой распределения  $\Delta C(R)$  появляется несколько максимумов, как в области малых, так и больших значений  $R$ . Вероятно, в присутствии поверхностно активных веществ под влиянием механической нагрузки происходит укрупнение агрегатов частиц ПМС и формирование полостей, радиус которых превышает 12 нм (см. рис. 2, б). Этот процесс сопровождается некоторым снижением межфазной энергии воды (см. рис. 2, а).

В композитной системе ПМС/SiO<sub>2</sub>/ДМТ наблюдается значительный рост величины межфазной энергии, которая становится существенно большей, чем для гидрофильной и гидрофобной компонент (см. рис. 2, а). Это может быть связано с формированием под влиянием механической нагрузки гетерогенной системы, в которой гидрофобная и гидрофильная компоненты присутствуют в виде компактных агрегатов, в межчастичном пространстве которых находится значительное количество сильносвязанной воды. Остальная часть воды заполняет промежутки между гидрофобными и гидрофильными агрегатами, при этом распределение по радиусам заполненных водой полостей имеет один широкий максимум при  $R = 10$  нм (см. рис. 2, б).

Несмотря на высокую гидратированность изученных систем, жидкая гидрофобная среда хлороформа оказывает значительное влияние на строение кластеров межфазной воды (рис. 3). В спектрах появляются несколько сигналов незамерзающей воды, различающихся по значению химического сдвига ( $\delta_H$ ). Сигнал 1 ( $\delta_H = 1$  м.д.) может быть отнесен к класте-

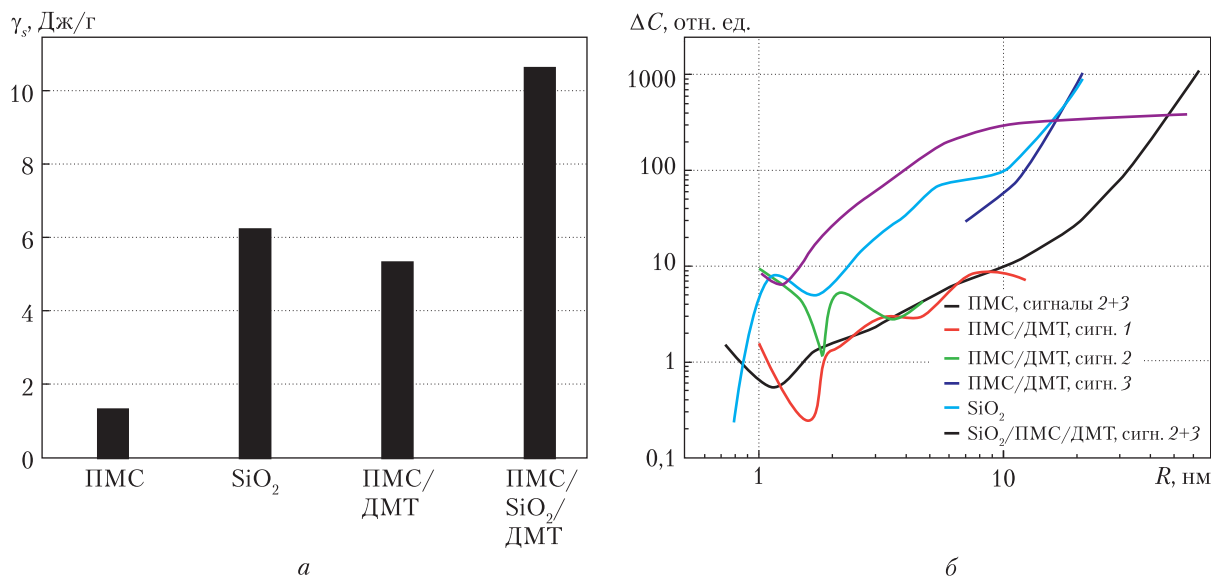


**Рис. 3.** Снятые при разных температурах спектры  $^1\text{H}$  ЯМР воды в гидратированных порошках ПМС, кремнезема и композитных системах на их основе в среде  $\text{CDCl}_3$

рам воды, не принимающих участия в формировании водородных связей [11, 12] (слабоассоциированная вода), сигнал 2 ( $\delta_{\text{H}} = 3,5\text{--}4$  м.д.) – к кластерам воды с частично разрушенной сеткой водородных связей, а сигнал 3 ( $\delta_{\text{H}} = 5$  м.д.) – к кластерам сильноассоциированной воды, близкой по структуре к жидкой воде.

По сравнению с образцами в воздушной среде (см. рис. 1) область сильных изменений интенсивности сигналов сдвинута в сторону высоких температур (вблизи  $T = 273$  К). Следовательно, под влиянием хлороформа происходит частичное вытеснение воды из межчастичного пространства. Наиболее наглядно этот эффект виден из сопоставления величин межфазной энергии в воздушной и органической средах (ср. рис. 2, а и рис. 4, а). Максимальный эффект наблюдается для гидратированного ПМС – величина межфазной энергии уменьшается от 23 до 1,3 Дж/г. Для остальных систем, в том числе и гидрофильного кремнезема, в среде  $\text{CDCl}_3$  величина межфазной энергии ( $\gamma_s$ ) уменьшается в 2–3 раза.





**Рис. 4.** Диаграмма изменения межфазной энергии воды в зависимости от состава композитной системы (а) и распределения по радиусам кластеров адсорбированной воды (б) в среде CDCl<sub>3</sub>

Уменьшение связывания воды при использовании среды слабополярного органического растворителя проявляется в значительном увеличении среднего размера кластеров незамерзающей воды (см. рис. 4, б). Большая часть воды заполняет межчастичные зазоры, радиус которых  $R > 10$  нм, в то время как более узкие поры заполняются хлороформом.

Показано, что при заполнении межчастичных зазоров ПМС способом гидроуплотнения межфазная энергия воды в межчастичных зазорах гидрофобного ПМС при одинаковой гидратированности вдвое превосходит межфазную энергию воды в гидрофильном кремнеземе. Это связано с меньшими линейными размерами межчастичных зазоров в ПМС по сравнению с SiO<sub>2</sub>.

В композитной системе, содержащей гидрофобную и гидрофильную компоненты (ПМС и SiO<sub>2</sub>) и добавку поверхностно активного вещества – ДМТ, наблюдается неаддитивный рост энергии связывания воды, который, вероятно, обусловлен формированием под влиянием механической нагрузки в присутствии воды микрогетерогенных участков, состоящих преимущественно из гидрофобной и гидрофильной компонент. Таким образом, с помощью механических нагрузок, а также путем добавления поверхностно активного вещества, можно управлять адсорбционными и гидратными свойствами композитных систем.

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Turov V.V., Mironyuk I.F. Adsorption layers of water on the surface of hydrophilic, hydrophobic and mixed silicas. *Colloids Surf. A*. 1998. **134**. P. 257–263.
2. Gun'ko V.M., Turov V.V., Pakhlov E.V., Krupskaya T.V., Borysenko M.V., Kartel M.T., Charnas B. Water interaction with hydrophobic versus hydrophilic nanosilica. *Langmuir*. 2018. **34**. P. 12145–12153.
3. Gun'ko V.M., Turov V.V., Pakhlov E.M., Matkovsky A.K., Krupskaya T.V., Kartel M.T., Charnas B. Blends of amorphous/crystalline nanoalumina and hydrophobic amorphous nanosilica. *J. Non-Cryst. Solids*. 2018. **500**. P. 351–356.



4. Gun'ko V.M., Turov V.V., Pakhlov E.M., Krupska T.V., Charmas B. Effect of water content on the characteristics of hydro-compacted nanosilica. *Appl. Surf. Sci.* 2018. **459**. P. 171-178.
5. Turov V.V., Gun'ko V.M., Pakhlov E.M., Krupska T.V., Tsapko M.D., Charmas B., Kartel M.T. Influence of hydrophobic nanosilica and hydrophobic medium on water bound in hydrophilic components of complex systems. *Colloids Surf. A* 2018. **552**. P. 39–47.
6. Слиянова И.Б., Денисова Т.И. Кремнийорганические адсорбенты: получение, свойства, применение. Киев: Наук. думка, 1988. 190 с.
7. Shevchenko Y.N., Dushanin B.M., Yashinina N.I. New silicon compounds – porous organosilicon matrices for technology and medicine. *Silicon for chemistry industry*. Sandefjord, 1996. P. 114–166.
8. Гидрогели метилкремневой кислоты как адсорбенты среднемолекулярных метаболитов и способ их получения: пат. 2111979 РФ. МПК С 08 G 77/02; заявл. 11.03.1994. Оpubл. 27.05.1998.
9. Клиническое применение препарата Энтеросгель у больных с патологией органов пищеварения. Новые подходы к терапии: Маев И.А., Шевченко Ю.Н., Петухов А.Б. (ред.). Москва, 2000. 90 с.
10. Волохонский И.А., Покрасен Н.М., Туров В.В. Селективная адсорбция белков плазмы крови кремнийорганическими адсорбентами. *Укр. хим. журн.* 1992. **58**, № 8. С. 640–644.
11. Туров В.В., Гулько В.М. Кластеризованная вода и пути ее использования. Киев: Наук. думка, 2011. 316 с.
12. Gun'ko V.M., Turov V.V. Nuclear magnetic resonance studies of interfacial phenomena. New York: Taylor & Francis, 2013. 1076 с.
13. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Глушко В.П. (ред.). Москва: Наука, 1978. 495 с.
14. Aksnes D.W., Førland K., Kimtys L. Pore size distribution in mesoporous materials as studied by  $^1\text{H}$  NMR. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2001. **3**. P. 3203–3207.
15. Petrov O.V., Furó I. NMR cryoporometry: Principles, applications and potential. *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.* 2009. **54**. P. 97–122.

Поступило в редакцию 26.02.2019

## REFERENCES

1. Turov, V. V. & Mironyuk, I. F. (1998). Adsorption layers of water on the surface of hydrophilic, hydrophobic and mixed silicas. *Colloids Surf. A.*, 134, pp. 257-263.
2. Gun'ko, V. M., Turov, V. V., Pakhlov, E. V., Krupska, T. V., Borysenko, M. V., Kartel, M. T. & Charmas, B. (2018). Water interaction with hydrophobic versus hydrophilic nanosilica. *Langmuir*, 34, pp. 12145-12153.
3. Gun'ko, V. M., Turov, V. V., Pakhlov, E. M., Matkovsky, A. K., Krupska, T. V., Kartel, M. T. & Charmas, B. (2018). Blends of amorphous/crystalline nanoalumina and hydrophobic amorphous nanosilica. *J. Non-Cryst. Solids*, 500, pp. 351-356.
4. Gun'ko, V. M., Turov, V. V., Pakhlov, E. M., Krupska, T. V. & Charmas, B. (2018). Effect of water content on the characteristics of hydro-compacted nanosilica. *Appl. Surf. Sci.*, 459, pp. 171-178.
5. Turov, V. V., Gun'ko, V. M., Pakhlov, E. M., Krupska, T. V., Tsapko, M. D., Charmas, B. & Kartel, M. T. (2018). Influence of hydrophobic nanosilica and hydrophobic medium on water bound in hydrophilic components of complex systems. *Colloids Surf. A*, 552, pp. 39-47.
6. Slyniakova, I. B. & Denisova, T. I. (1988). Organosilicon adsorbents: preparation, properties, application. Kiev: Naukova dumka (in Russian).
7. Shevchenko, Y. N., Dushanin, B. M. & Yashinina, N. I. (1996). New silicon compounds – porous organosilicon matrices for technology and medicine. In *Silicon for chemistry industry* (pp. 114-166). Norway: Sandefjord.
8. Pat. 2111979 RU. IPC C 08 G 77/02, Methylsilicic acid hydrogels as adsorbents of average molecular metabolites and a method of their producing, Shevchenko J.N., Dushanin B.M., Poljanskij A.V., Jashina N.I., Publ. 27.05.1998 (in Russian).
9. Maev, I. A., Shevchenko, Yu. N. & Petuchov, A. B. (Eds.) (2000). The clinical use of Enterogel in patients with pathology of the digestive system. New approaches to therapy. Moscow (in Russian).
10. Volochonskiy, I. A., Pokrasen, N. M. & Turov, V. V. (1992). Selective adsorption of plasma proteins with organosilicon adsorbents. *Ukr. Khim. Zhurn.*, 58, No. 8, pp. 640-644 (in Russian).
11. Turov, V. V. & Gun'ko, V. M. (2011). Clustered water and ways to use it. Kiev: Naukova dumka (in Russian).

12. Gun'ko, V. M. & Turov, V. V. (2013). Nuclear magnetic resonance studies of interfacial phenomena. New York: Taylor & Francis.
13. Glushkov, V. P. (Ed.). (1978). Thermodynamic properties of individual substances. Moscow: Nauka (in Russian).
14. Aksnes, D. W., Førland, K. & Kimtys, L. (2001). Pore size distribution in mesoporous materials as studied by  $^1\text{H}$  NMR. Phys. Chem. Chem. Phys., 3, pp. 3203-3207.
15. Petrov, O. V., Furó, I. (2009). NMR cryoporometry: Principles, applications and potential. Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc., 54, pp. 97-122.

Received 26.02.2019

*В.В. Туров, І.І. Геращенко, Т.В. Крупська, К.О. Степанюк*

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, Київ

E-mail: krupska@ukr.net

#### ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ КОМПОЗИТНОЇ СИСТЕМИ ПОЛІМЕТИЛСИЛОКСАН/КРЕМНЕЗЕМ/ВОДА В ПРИСУТНОСТІ ПОВЕРХНЕВО АКТИВНОЇ РЕЧОВИНИ—ДЕКАМЕТОКСИНУ

Методом низькотемпературної  $^1\text{H}$  ЯМР спектроскопії вивчено зв'язування води в гідратованих порошках поліметилсилоксану (ПМС), кремнезему та композитній системі ПМС/ $\text{SiO}_2$ /декаметоксин/ $\text{H}_2\text{O}$ . Показано, що при заповненні міжчастинкових зазорів ПМС способом гідроущільнення міжфазна енергія води в міжчастинкових зазорах гідрофобного ПМС при однаковій гідратованості вдвічі перевищує міжфазну енергію води в гідрофільному кремнеземі. У композитній системі ПМС/ $\text{SiO}_2$ /декаметоксин/ $\text{H}_2\text{O}$  відбувається неаддитивне зростання енергії зв'язування води, яке, ймовірно, обумовлене формуванням під впливом механічного навантаження в присутності води мікрогетерогенних ділянок, що складаються переважно з гідрофобної та гідрофільної компонент. Таким чином, за допомогою механічних навантажень, а також шляхом додавання поверхнево активної речовини, можна керувати адсорбційними та гідратними властивостями композитних систем.

**Ключові слова:** поліметилсилоксан, гідрофільний діоксид кремнію, метилкремнезем, декаметоксин.

*V.V. Turov, I.I. Gerashchenko, T.V. Krupska, K.O. Stepanuk*

Chuiko Institute of Surface Chemistry of the NAS of Ukraine, Kiev

E-mail: krupska@ukr.net

#### FEATURES OF THE FORMATION OF THE COMPOSITE SYSTEM POLYMETHYLSILOXANE/SILICA/WATER IN THE PRESENCE OF A SURFACTANT—DECAMETHOXINE

The method of low-temperature  $^1\text{H}$  NMR spectroscopy is used to study the binding of water in hydrated powders of polymethylsiloxane and silica and in the composite system PMS/ $\text{SiO}_2$ /decametoxine/ $\text{H}_2\text{O}$ . It is shown that, when filling interparticle gaps in the PMP by the method of hydro-seaming, the interphase energy of water in the interparticle gaps of a hydrophobic PMS with the same hydration is twice the interphase energy of water in hydrophilic silica. In the composite system PMS/ $\text{SiO}_2$ /decametoxine/ $\text{H}_2\text{O}$ , there is a nonadditive increase in the energy of water binding, which is probably due to the formation of the effect of mechanical loading in the presence of water microheterogeneous areas consisting predominantly of hydrophobic and hydrophilic components. Thus, by means of mechanical loads, as well as by adding a surfactant, it is possible to control the adsorption and hydration properties of composite systems.

**Keywords:** polymethylsiloxane, hydrophilic silica, methylsilica, decametoxine.

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.05.091>

УДК 582.736.3

**С.М. Романчук**

Інститут ботаніки ім. М.Г. Холодного НАН України, Київ

E-mail: rrrsm@ukr.net

## **Вплив X-опромінення на експресію гена $\beta$ -глюкозидази РYК 10 в проростках *Arabidopsis thaliana* (L.) Heynh.**

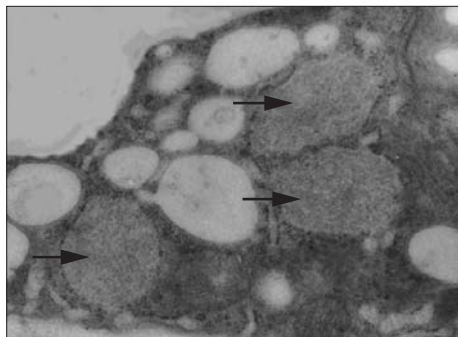
*Представлено членом-кореспондентом НАН України Є.Л. Кордюм*

*Вперше досліджено експресію гена  $\beta$ -глюкозидази РYК 10 в проростках *A. thaliana* під дією X-опромінення в дозах 0,5, 1, 2, 4, 6, 8, 10 та 12 Гр. Встановлено, що за умов X-опромінення збільшення кількості ЕР-тілець та підвищення активності  $\beta$ -глюкозидази відбувається за рахунок високої експресії гена РYК 10. Вперше показано роль ЕР-тілець, які містять  $\beta$ -глюкозидазу (РYК 10), в адаптації проростків *A. thaliana* на дію X-опромінення. Підвищення експресії гена РYК 10 за цих умов є частиною внутрішньої програми захисту на вплив зовнішніх чинників.*

**Ключові слова:** ген РYК 10,  $\beta$ -глюкозидаза, ЕР-тільця, X-опромінення, *Arabidopsis thaliana*.

На сьогодні поглиблюються дослідження щодо механізмів адаптації рослин до мікрогравітації та іонізуючої радіації, оскільки рослини є головним компонентом автотрофної ланки біорегенеративних систем життєзабезпечення космонавтів [1]. Згідно з даними НАСА (США) на орбітальній станції в межах кабіни космічного корабля дози іонізуючої радіації, які впливають на живі організми, коливаються в діапазоні від 5 до 12 мкГр/год [2]. Серед видів рослин, які використовувалися в космічних і наземних експериментах, найбільш стійкими до радіаційного випромінювання вважаються представники родини Brassicaceae, для яких описані ЕР-тільця (рис. 1), що є похідними гранулярного ендоплазматичного ретикулума (ЕР).

ЕР-тільця в клітинах *Arabidopsis thaliana* [3] вибірково накопичують фермент  $\beta$ -глюкозидазу (глюкозидглюкогідролазу, КФ 3.2.1.21 (РYК10)) [4] із сигналом утримання в компартментах ЕР [5]. У попередніх дослідженнях нами встановлено, що ЕР-тільця є чутливими до кліностагування (симульованої мікрогравітації) та дії X-опромінення, оскільки відбувалося збільшення кількості та площі ЕР-тілець на зрізах статоцитів і клітин дистальної зони розтягу (ДЗР) кореневих апексів *A. thaliana* у середньому в два рази відносно контролю [6, 7]. Також нами виявлено збільшення активності  $\beta$ -глюкозидази під дією X-опромінення порівняно з контролем [8]. Підвищення або зниження рівня експресії під впливом чинників космічного польоту відомо для великого числа генів, залучених у широке коло



**Рис. 1.** Фрагмент клітини дистальної зони розтягу кореневого апекса *A. thaliana*. Стрілками вказані ЕР-тілця (трансмисійна електронна мікроскопія). Масштаб — 200 нм

клітинних процесів, у тому числі  $\text{Ca}^{2+}$  і ліпід-сигналінг, біосинтез клітинної оболонки, загальний метаболізм, насамперед вуглеводний і ліпідний, реакції на стрес, синтез білків [9, 10]. Основними моделями у цих експериментах слугували проростки *A. thaliana*. У на-

ших дослідженнях з моделювання мікрогравітації встановлено, що за умов кліностакування у проростках *A. thaliana* відбувається значне підвищення відносної експресії гена *РУК 10* порівняно зі стаціонарними умовами росту [11]. Вивчення впливу Х-опромінення на експресію гена  $\beta$ -глюкозидази *РУК 10* у проростках *A. thaliana* доповнить розуміння ролі ЕР-тілця в адаптації рослин до зовнішніх чинників.

Для досліджень використовували проростки *Arabidopsis thaliana* (L.) Heunh., екотип Columbia (Col-0), вирощені з попередньо стерилізованого та стратифікованого насіння, яке висівали на живильне середовище Мурасіге та Скуга у чашки Петрі діаметром 120 мм по 100–120 насінин у кожному. Проростки росли за умов освітлення  $93 \text{ мкмоль} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$  із фото-періодом 16/8 год (світло/темрява) при температурі 22–24 °С та вологості  $67 \pm 1 \%$  протягом 3 та 13 діб з моменту проростання насіння. 3-добові проростки, що росли в окремих чашках Петрі, опромінювали рентгенівськими променями на приладі РУМ-17 (Росія) (потужність дози 0,43 сГр/с) у дозах 0,5, 1, 2, 4, 6, 8, 10 та 12 Гр. У експерименті брали проростки через 2 год та 10 діб після Х-опромінення. Контролем слугували 3- та 13-добові проростки, які не були опромінені.

Для виділення РНК брали по 100 мг проростків відразу після закінчення експериментів. Операцію проводили з використанням набору реактивів TRI-REAGENT (“Sigma”, Німеччина) за інструкцією, наданою виробником реактивів. Для контролю якості РНК відразу після її виділення проводили електрофорез в 1%-му агарозному гелі в *трис*-ацетатному буфері (ТАЕ). Перед синтезом кДНК для видалення слідів геномної ДНК виділену РНК обробляли ДНКазою I (“Fermentas”, Литва). кДНК отримували з РНК за допомогою реакції зворотної транскрипції з використанням набору реактивів “Fermentas” зі зворотною транскриптазою M-MLV (“Fermentas”, Литва) за інструкцією, наданою виробником реактивів, на приладі “Терцик” (“ДНК-Технологія”, Росія). ПЛР у реальному часі проводили з використанням набору реактивів “Maxima Sybr Green Real Time” (“Fermentas”, Литва) за інструкцією, наданою виробником реактивів, на приладі “Real-Time PCR IQ-Cycler” (“BioRad”, США). Для визначення відносної експресії гена  $\beta$ -глюкозидази *A. thaliana* *РУК 10* (*At3g09260*) вибрано праймери з бази даних NCBI (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov>):

прямий: 5'-AGGATTGTGAAGGATTTCCGAGA-3';

зворотний: 5'-AGAAGAGCAACGACCAGGTG-3'.

Кінцева концентрація праймерів у готовому розчині становила 5 пМ; реакційний об'єм — 20 мкл. Інтенсивність флуоресценції вимірювали при температурі 77–79 °С, криву плавлення — у діапазоні 60–94 °С з інтервалом 0,5 °С. Час вимірювання становив 10 с.

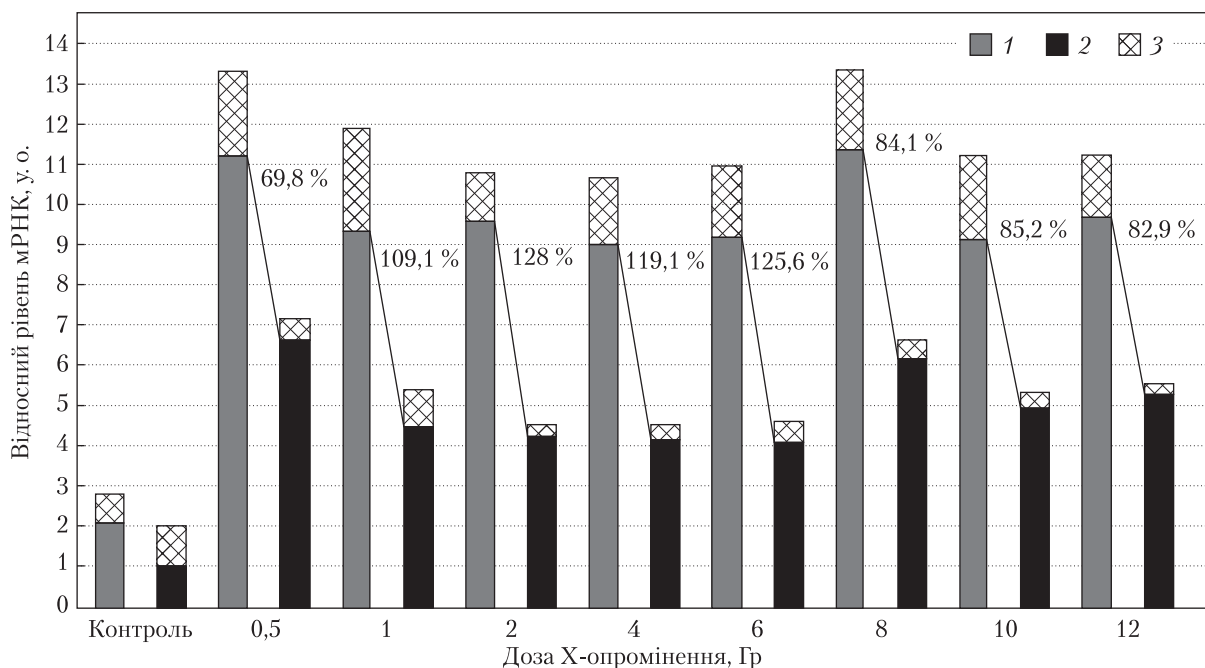
Одержані результати аналізували за допомогою програмного забезпечення приладу. Рівень відносної експресії гена *PYK 10* виражали в умовних одиницях (у. о.).

Усі дослідження проводили не менше ніж у трьох біологічних та трьох аналітичних повторях. Статистичну обробку даних здійснювали за критерієм Стьюдента (*T*-test) ( $p \leq 5\%$ ) та з використанням дисперсійного аналізу (ANOVA). Побудову діаграми виконано в програмі Excel пакета Microsoft Office 2010.

Отримані результати ПЛР у реальному часі показали значне зростання щодо контролю відносної експресії гена *PYK 10* у 3-добових проростках через 2 год після дії кожної дози X-опромінення (рис. 2). Найбільші значення відносної експресії гена *PYK 10* спостерігали за умов впливу X-опромінення в дозах 0,5 та 8 Гр, яка була вищою порівняно з контролем у 5,4 та 5,5 раза відповідно. X-опромінення у дозах 2 та 12 Гр спричиняло підвищення відносної експресії гена *PYK 10* у 4,7 раза, 1 та 6 Гр — у 4,6 раза, 10 Гр — у 4,5 раза, 4 Гр — у 4,4 раза щодо контролю.

Через 10 діб після X-опромінення у 13-добових проростках також встановлено значне зростання відносної експресії гена *PYK 10* під дією кожної дози порівняно з контролем (див. рис. 2). Найбільші значення відносної експресії гена *PYK 10* також відмічали у разі дії доз 0,5 та 8 Гр, яка була вищою від контролю у 6,6 та 6,2 раза відповідно. X-опромінення в дозі 12 Гр спричиняло зростання відносної експресії гена *PYK 10* у 5,3 раза, 10 Гр — у 4,9 раза, 1 Гр — у 4,5 раза, 2 та 4 Гр — у 4,2 раза, 6 Гр — у 4,1 раза порівняно з контролем.

Варто відзначити, що відносна експресія гена *PYK 10* через 2 год після X-опромінення була значно вищою за таку через 10 діб після X-опромінення (див. рис. 2), а саме: у разі



**Рис. 2.** Відносна експресія гена  $\beta$ -глюкозидази *PYK 10* в контролі, через 2 год та через 10 діб після X-опромінення 3-добових проростків *A. thaliana* в різних дозах. 1 — 3-добові проростки; 2 — 13-добові проростки, 3 — стандартне відхилення



опромінення в 0,5 Гр — на 69,8 %; 1 Гр — на 109,1 %; 2 Гр — на 128 %; 4 Гр — на 116,1 %; 6 Гр — на 125,6 %; 8 Гр — на 84,1 %; 10 Гр — на 85,2 %; 12 Гр — на 82,9 %.

Вперше отримані нами результати щодо підвищення відносної експресії гена  $\beta$ -глюкозидази *РУК 10* у проростках *A. thaliana* за умов Х-опромінення в дозах 0,5, 1, 2, 4, 6, 8, 10 та 12 Гр по відношенню до контролю узгоджуються з результатами, отриманими під час дослідження ультраструктури ЕР-тілець, головним компонентом яких є  $\beta$ -глюкозидаза. Виявлено, що їхня кількість та площа на зрізах статочитів і клітин ДЗР кореневих апексів *A. thaliana* також збільшувалася після Х-опромінення порівняно з контролем більш ніж удвічі [7]. Також ці результати узгоджуються з даними визначення активності  $\beta$ -глюкозидази через 2 год та 10 діб після Х-опромінення в дозах від 0,5 до 12 Гр [8]. Таким чином, результати ПЛР у реальному часі засвідчили, що за умов Х-опромінення збільшення кількості ЕР-тілець та підвищення активності  $\beta$ -глюкозидази відбувається за рахунок високої експресії гена *РУК 10*. Також нами встановлено, що як експресія гена *РУК 10*, так і активність  $\beta$ -глюкозидази через 10 діб після Х-опромінення були меншими порівняно з такими через 2 год після Х-опромінення. Цей факт може свідчити про те, що за період 10 діб захисні реакції клітин *A. thaliana* на дію іонізуючої радіації набувають адаптивного характеру, ключову роль в яких виконує  $\beta$ -глюкозидаза. Результати багатьох експериментів інших дослідників також показали, що під дією на проростки *A. thaliana* зовнішніх чинників, таких як механічне пошкодження поверхневих тканин рослини [12, 13], дія гормонів [12, 14], колонізація коренів рослини ендоефітними грибами [15], зростала експресія гена  $\beta$ -глюкозидази *РУК 10* порівняно з контролем. Отримані нами результати повною мірою підтверджують літературні відомості щодо накопичення мРНК  $\beta$ -глюкозидази (*РУК 10*) в проростках *A. thaliana* під дією зовнішніх чинників.

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Sychev V.N., Levinskikh M.A., Podolsky I.G. Biological component of life support systems for a crew in long-duration space expeditions. *Acta Astronaut.* 2008. **63**. P. 1119–1125. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2008.01.001>
2. International Space Station Internal Radiation Monitoring (ISS Internal Radiation Monitoring) – 05.04.2017. URL: [https://www.nasa.gov/mission\\_pages/station/research/experiments/1043.html](https://www.nasa.gov/mission_pages/station/research/experiments/1043.html)
3. Hayashi Y., Yamada K., Shimada T., Matsushima R., Nishizawa N.K., Nishimura M., Hara-Nishimura I. A proteinase-storing body that prepares for cell death or stresses in the epidermal cells of Arabidopsis. *Plant Cell Physiol.* 2001. **42**. P. 894–899. doi: <https://doi.org/10.1093/pcp/pce144>
4. Ketudat Cairns J.R., Esen A.  $\beta$ -glucosidases. *Cell Mol. Life Sci.* 2010. **67**, № 20. P. 3389–3405. doi: <https://doi.org/10.1007/s00018-010-0399-2>
5. Matsushima R., Kondo M., Nishimura M., Hara-Nishimura I. A novel ER-derived compartment, the ER body, selectively accumulates a  $\beta$ -glucosidase with an ER retention signal in Arabidopsis. *Plant J.* 2003. **33**. P. 493–502. doi: <https://doi.org/10.1046/j.1365-313X.2003.01636.x>
6. Romanchuk S.M. Ultrastructure of the statocytes and cells of the distal elongation zone of *Arabidopsis thaliana* under the conditions of clinorotation. *Cytol. Genet.* 2010. **44**, № 6. P. 329–333. doi: <https://doi.org/10.3103/S0095452710060010>
7. Romanchuk S. ER bodies in *Arabidopsis thaliana* root apices under clinorotation and after X-Ray irradiation. Plant functioning under environmental stress: Proceedings of the 9th International conference (Cracow, Poland, 12–15 Sept. 2012). Cracow, 2012. P. 185–192.
8. Романчук С.М. Активність  $\beta$ -глюкозидази в проростках *Arabidopsis thaliana* (L.) Heunh при дії іонізуючого випромінювання. *Вісн. Харків. нац. ун-ту ім. В. Н. Каразіна. Сер. Біологія.* 2017. Вип. 29. С. 103–108. doi: <https://doi.org/10.26565/2075-5457-2017-29-13>

9. Paul A.-L., Zupanska A., Ostrow D.T., Zhang Y., Sun Y., Li J.-L., Shanker S., Farmerie W.G., Amalfitano C.E., Ferl R.J. Spaceflight transcriptomes: Unique responses to a novel environment. *Astrobiology*. 2012. **12**. P. 40–56. doi: <https://doi.org/10.1089/ast.2011.0696>
10. Correll M.J., Pyle T.P., Millar K.D.L., Sun Y., Yao J., Edelman R.E., Kiss J.Z. Transcriptome analyses of *Arabidopsis thaliana* seedlings grown in space: implications for gravity-responsive genes. *Planta*. 2013. **238**. P. 519–533. doi: <https://doi.org/10.1007/s00425-013-1909-x>
11. Romanchuk S.N., Kordyum E.L. ER bodies in *Arabidopsis thaliana* seedlings are sensitive to simulated microgravity and ionizing radiation. *ELGRA Newsletter*. 2014. **9**. P. 10–11.
12. Matsushima R., Hayashi Y., Kondo M., Shimada T., Nishimura M., Hara-Nishimura I. An endoplasmic reticulum derived structure that is induced under stress conditions in Arabidopsis. *Plant Physiol*. 2002. **130**. P. 1807–1814. doi: <https://doi.org/10.1104/pp.009464>
13. Ogasawara K., Yamada K., Christeller J.T., Kondo M., Hatsugai N., Hara-Nishimura I., Nishimura M. Constitutive and inducible ER bodies of *Arabidopsis thaliana* accumulate distinct  $\beta$ -glucosidases. *Plant Cell Physiol*. 2009. **50**, № 3. P. 480–488. doi: <https://doi.org/10.1093/pcp/pcp007>
14. Matsushima R., Fukao Y., Nishimura M., Hara-Nishimura I. NAI1 gene that encodes a basic-helix-loop-helix-type putative transcription factor that regulates the formation of a novel ER-derived structure, the ER body. *Plant Cell*. 2004. **16**. P. 1536–1549. doi: <https://doi.org/10.1105/tpc.021154>
15. Sherameti I., Venus Y., Drzewiecki C., Tripathi S., Dan V.M., Nitz I., Varma A., Grundler F.M., Oelmüller R. PΥK10, a  $\beta$ -glucosidase located in the endoplasmic reticulum, is crucial for the beneficial interaction between *Arabidopsis thaliana* and the endophytic fungus *Piriformospora indica*. *Plant. J.* 2008. **54**. P. 428–439. doi: <https://doi.org/10.1111/j.1365-313X.2008.03424.x>

Надійшло до редакції 28.02.2019

## REFERENCES

1. Sychev, V. N., Levinskikh, M. A. & Podolsky, I. G. (2008). Biological component of life support systems for a crew in long-duration space expeditions. *Acta Astronaut*, 63, pp. 1119-1125. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2008.01.001>
2. International Space Station Internal Radiation Monitoring (ISS Internal Radiation Monitoring) – 05.04.2017. Retrieved from [https://www.nasa.gov/mission\\_pages/station/research/experiments/1043.html](https://www.nasa.gov/mission_pages/station/research/experiments/1043.html)
3. Hayashi, Y., Yamada, K., Shimada, T., Matsushima, R., Nishizawa, N. K., Nishimura, M. & Hara-Nishimura, I. (2001). A proteinase-storing body that prepares for cell death or stresses in the epidermal cells of Arabidopsis. *Plant Cell Physiol*, 42, pp. 894-899. doi: <https://doi.org/10.1093/pcp/pce144>
4. Ketudat Cairns, J. R. & Esen, A. (2010).  $\beta$ -glucosidases. *Cell Mol. Life Sci.*, 67, No. 20, pp. 3389-3405. doi: <https://doi.org/10.1007/s00018-010-0399-2>
5. Matsushima, R., Kondo, M., Nishimura, M. & Hara-Nishimura, I. (2003). A novel ER-derived compartment, the ER body, selectively accumulates a  $\beta$ -glucosidase with an ER retention signal in Arabidopsis. *Plant J.*, 33, pp. 493-502. doi: <https://doi.org/10.1046/j.1365-313X.2003.01636.x>
6. Romanchuk, S. M. (2010). Ultrastructure of the statocytes and cells of the distal elongation zone of *Arabidopsis thaliana* under the conditions of clinorotation. *Cytol. Genet.*, 44, No. 6, pp. 329-333. doi: <https://doi.org/10.3103/S0095452710060010>
7. Romanchuk, S. (2012, September). ER bodies in *Arabidopsis thaliana* root apices under clinorotation and after X-Ray irradiation. Proceedings of the 9th International Conference Plant functioning under environmental stress (pp. 185-192). Cracow.
8. Romanchuk, S. M. (2017). The  $\beta$ -glucosidase activity in *Arabidopsis thaliana* (L.) Heynh seedlings under exposure to ionizing radiation. *J. V.N. Karazin Kharkiv National University*, Iss. 29, pp. 103-108. doi: <https://doi.org/10.26565/2075-5457-2017-29-13>
9. Paul, A.-L., Zupanska, A., Ostrow, D. T., Zhang, Y., Sun, Y., Li, J.-L., Shanker, S., Farmerie, W. G., Amalfitano, C. E. & Ferl, R. J. (2012). Spaceflight transcriptomes: Unique responses to a novel environment. *Astrobiology*, 12, pp. 40-56. doi: <https://doi.org/10.1089/ast.2011.0696>
10. Correll, M. J., Pyle, T. P., Millar, K. D. L., Sun, Y., Yao, J., Edelman, R. E. & Kiss, J. Z. (2013). Transcriptome analyses of *Arabidopsis thaliana* seedlings grown in space: implications for gravity-responsive genes. *Planta*, 238, pp. 519-533. doi: <https://doi.org/10.1007/s00425-013-1909-x>

11. Romanchuk, S. N. & Kordyum, E. L. (2014). ER bodies in *Arabidopsis thaliana* seedlings are sensitive to simulated microgravity and ionizing radiation. ELGRA Newsletter, 9, pp. 10-11.
12. Matsushima, R., Hayashi, Y., Kondo, M., Shimada, T., Nishimura, M. & Hara-Nishimura, I. (2002). An endoplasmic reticulum derived structure that is induced under stress conditions in *Arabidopsis*. Plant Physiol., 130, pp. 1807-1814. doi: <https://doi.org/10.1104/pp.009464>
13. Ogasawara, K., Yamada, K., Christeller, J. T., Kondo, M., Hatsugai, N., Hara-Nishimura, I. & Nishimura, M. (2009). Constitutive and inducible ER bodies of *Arabidopsis thaliana* accumulate distinct  $\beta$ -glucosidases. Plant Cell Physiol., 50, No. 3. pp. 480-488. doi: <https://doi.org/10.1093/pcp/pcp007>
14. Matsushima, R., Fukao, Y., Nishimura, M. & Hara-Nishimura, I. (2004). NAI1 gene that encodes a basic-helix-loop-helix-type putative transcription factor that regulates the formation of a novel ER-derived structure, the ER body. Plant Cell, 16, pp. 1536-1549. doi: <https://doi.org/10.1105/tpc.021154>
15. Sherameti, I., Venus, Y., Drzewiecki, C., Tripathi, S., Dan, V. M., Nitz, I., Varma, A., Grundler, F. M. & Oelmüller, R. (2008). PYK10, a  $\beta$ -glucosidase located in the endoplasmic reticulum, is crucial for the beneficial interaction between *Arabidopsis thaliana* and the endophytic fungus *Piriformospora indica*. Plant J., 54, pp. 428-439. doi: <https://doi.org/10.1111/j.1365-313X.2008.03424.x>

Received 28.02.2019

С.Н. Романчук

Институт ботаники им. Н.Г. Холодного НАН Украины, Киев

E-mail: rrsn@ukr.net

#### ВЛИЯНИЕ X-ОБЛУЧЕНИЯ НА ЭКСПРЕССИЮ ГЕНА $\beta$ -ГЛЮКОЗИДАЗЫ PYK 10 В ПРОРОСТКАХ *ARABIDOPSIS THALIANA* (L.) HEYNH.

Впервые исследована экспрессия гена  $\beta$ -глюкозидазы PYK 10 в проростках *A. thaliana* при действии X-облучения в дозах 0,5, 1, 2, 4, 6, 8, 10 и 12 Гр. Установлено, что при X-облучении увеличение количества ЭР-телец и повышение активности  $\beta$ -глюкозидазы происходит за счет высокой экспрессии гена PYK 10. Впервые показана роль ЭР-телец, которые содержат  $\beta$ -глюкозидазу (PYK 10), в адаптации проростков *A. thaliana* на действие X-облучения. Повышение экспрессии гена PYK 10 при этих условиях является частью внутренней программы защиты на воздействие внешних факторов.

**Ключевые слова:** ген PYK 10,  $\beta$ -глюкозидаза, ЭР-тельца, X-облучение, *Arabidopsis thaliana*.

S.M. Romanchuk

M.G. Kholodny Institute of Botany of the NAS of Ukraine, Kiev

E-mail: rrsn@ukr.net

#### THE EFFECT OF X-IRRADIATION ON $\beta$ -GLUCOSIDASE PYK 10 GENE EXPRESSION IN *ARABIDOPSIS THALIANA* (L.) HEYNH. SEEDLINGS

We have firstly investigated the expression of  $\beta$ -glucosidase PYK 10 gene in *A. thaliana* seedlings under X-radiation doses of 0.5, 1, 2, 4, 6, 8, 10, and 12 Gy. An increase in the number of ER-bodies and the  $\beta$ -glucosidase activity correlates with the enhancement of the PYK 10 expression. The increased PYK 10 expression in *A. thaliana* seedlings under X-radiation is a part of the internal program of plant protection against the action of environmental factors. ER-bodies containing  $\beta$ -glucosidase may be one of the main components of a plant protection system from the influence of X-radiation.

**Keywords:** gene PYK 10,  $\beta$ -glucosidase, ER-bodies, X-radiation, *Arabidopsis thaliana*.



---

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.05.097>

UDC 579.258:577.112:581.43:582.542.11:58.032.1

**I.I. Ovrutskya, E.L. Kordyum**

M.G. Kholodny Institute of Botany of the NAS of Ukraine, Kiev

E-mail: cellbiol@ukr.net, airin1900@gmail.com

## ***PIP2;1* aquaporin gene expression in maize hybrids different for drought tolerance to water deficit**

*Presented by Corresponding Member of the NAS of Ukraine E.L. Kordyum*

*At the mRNA level, different PIP2;1 aquaporin gene expressions in roots of drought-tolerant and drought-sensitive maize genotypes with sufficient substrate moisture, as well as their distinct responses towards water deficit, are shown. An analysis of the obtained data allow us to consider PIP2;1 expression as a possible molecular marker in maize breeding for drought tolerance.*

**Keywords:** *Zea mays* L., drought tolerance, PIP2;1-aquaporin expression, RT-PCR.

To date, it is well known that aquaporins, which are membrane proteins forming the water channels, ensure the transport of water through membranes and/or facilitate the transport of small neutral solutes (urea, boric acid, silicic acid) or gases (ammonia, carbon dioxide), and thus they are involved in many basic vital important processes such as cell signalling, stress responses and nutrient acquisition [1–3]. The multiple mechanisms, including the regulation of transcript or protein abundance, subcellular trafficking, or gating by phosphorylation or cytosolic protons, can regulate the aquaporin transport activity [2].

Aquaporins of the plasmalemma (plasma membrane intrinsic proteins, PIPs) are the most numerous family in plants, which is divided in 2 subfamilies: PIP1 and PIP2, the latter is characterized with a significantly more capability of the water transport in comparison with PIP1 [4]. In the *Arabidopsis thaliana* L. genome, there are 35 genes coding aquaproteins [5, 6], 36 genes – in *Zea mays* L. [7], and 33 genes in *Oryza sativa* L. [8]. Different responses of PIP aquaporin genes to water stress – enhancement or weakening of the expression or absence of any response – have been established that supposes their unequal role in the regulation of the water transport through a membrane. It is suggested that aquaporins play distinct roles in facilitating a water flux and maintaining the water potential in cells along with various water transport activities. In addition, aquaporins are involved in the plant adaptation to water deficiency [3, 9]. Therefore, an aim of our work was to study the PIP2;1 aquaporin gene expression in four, different for drought resistant hybrids of *Z. mays* grown under conditions of low soil moisture.

© I.I. Ovrutskya, E.L. Kordyum, 2019

ISSN 1025-6415. Допов. Нац. акад. наук Укр. 2019. № 5

97

**Material and Methods.** Four corn hybrids were selected, namely Dostatok (drought resistant) and Pereiaslavskii (moderately drought resistant) kindly provided by the Institute of Physiology and Genetics of the National Academy of Sciences of Ukraine (Kyiv), and Flagman (drought resistant) and Yacht (moderately drought resistant) kindly provided by the Breeding and Genetic Institute – a National Center for Seed Research and Variety Research (Odessa). 120 plants were grown in vegetation vessels filled with sandy substrate of optimum 70 % moisture under the tent during 10 days. Then 60 plants continued to grow under these conditions and were kept as controls, 60 plants continued to grow in the substrate of 30 % moisture for 10 days as this period of drought is critical for plant growth. Experiments were performed in three replicates. Substrate moisture was controlled every two days according to [10, pp. 75-77].

The relative amounts of expression of mRNA encoding *PIP2;1* aquaporin were determined in corn roots by the reverse transcription-polymerase chain reaction (RT-PCR). Total RNA was extracted using TRI-REAGENT (Sigma) according to the manufacturer protocol. Yield was determined using the absorbance of RNA at 260 nm. RT-PCR was carried on the FERMENTAS protocol (Lithuania) with an amplificator Terzik (DNA-technology, Russia). PCR was carried using the obtained cDNA and primers with 19-21 nucleotides:

Forward 5'- GTT CCA GAG CGC CTA CTT C -3'

Reverse 5'- GGG CTT GTC CTT GTT GTA GAT -3'.

The PCR products were separated on 1.5 % agarous gel, visualized in ultraviolet light and photographed using the system of gel visualization Bio-Vision (VILBER LOURMAT). Actin gene expression was used as an endogenic control on passing the reaction with primers of 18–20 nucleotides.

Forward 5'- GTT CCA ACC ATC CCT TGT-3'

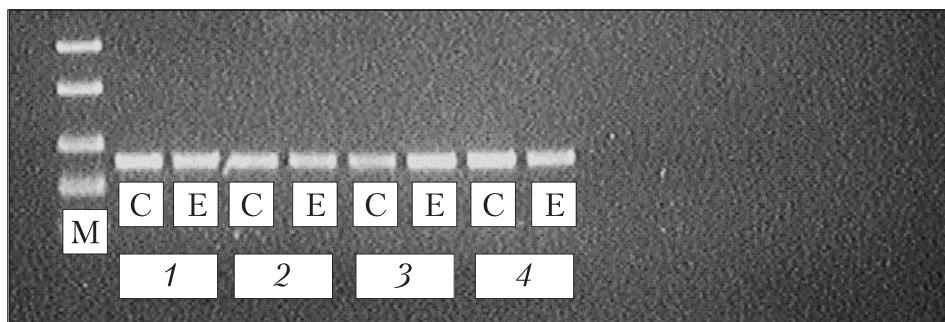
Reverse 5'- CGT GAT CTC CTT GCT CAT AC-3'.

The level of gene expression was measured using GelAnalyzer2010a ([www.GelAnalyzer.exe](http://www.GelAnalyzer.exe)). Software Image Mater Total Lab™ was used to estimate the quantity of products. The obtained data are processed statistically using Microsoft Excel 2013.

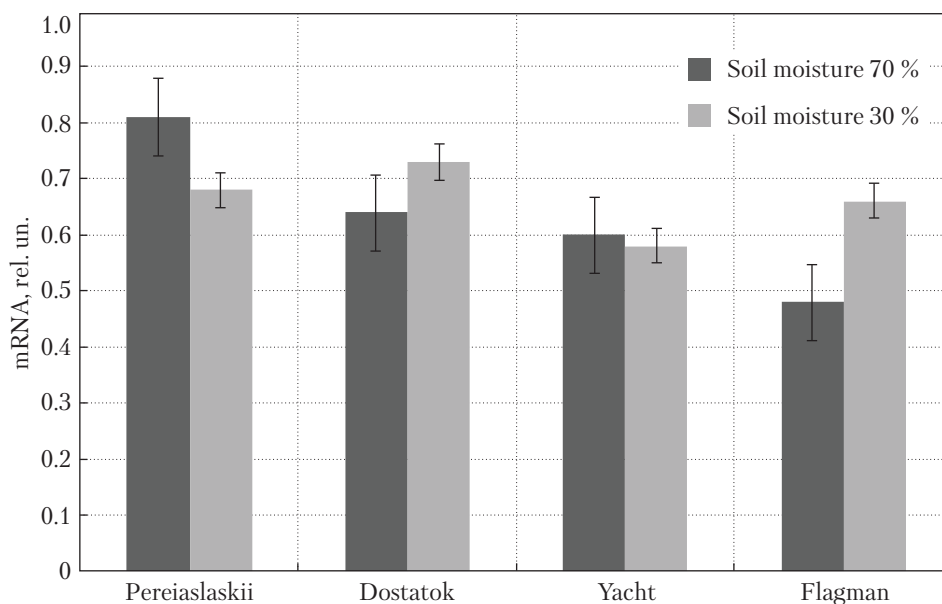
**Results and Discussion.** At the mRNA level, different expressions of *PIP2;1* in roots of drought-tolerant and drought-sensitive genotypes in normal conditions (substrate moisture 70 %), as well as their distinct responses towards water deficit (substrate moisture 30 %) (Fig. 1, 2), are shown.

Expression of *PIP2;1* increased in Dostatok and Flagman growing on the substrate with 30 % moisture, while expression of this gene lowered or remained at about the same level in Pereiaslavskii and Yacht under these conditions. In addition, these data indicate up-regulation of *PIP2;1* transcripts in drought-resistance hybrid and down-regulation of transcripts in drought-sensitive upon water deficit, which supposes the genotype-specific aquaporin transcription in investigated maize genotypes.

The obtained results are consistent with available literature data on the participation of PIP aquaporins in plant responses to drought stress. So, distinct responses of PIP aquaporin genes to water stress by treatment with 20 % PEG have been revealed in *Oryza sativa* L. cultivars: drought-resistance upland Zhonghan 3 (spp. Indica) and drought-sensitive lowland Xiushui 63 (spp. Japonica) [11]. PIP aquaporin gene expression was significantly up-regulated in upland rice, whereas it remained unchanged or down-regulated in lowland rice. Up- or down-regulation of



**Fig. 1.** Agarose gel-electrophoresis with the products of RT-PCR, *PIP2;1* gene. 1 – Pereiaslavskii; 2 – Dostatok; 3 – Yacht; 4 – Flagman. M – marker, C – control (substrate moisture 70 %), E – experiment (substrate moisture 30 %)



**Fig. 2.** *PIP2;1* aquaporin gene expression in roots of maize hybrids different for drought tolerance grown in substrates with 70 % and 30 % moisture

PIP genes was also described in *A. thaliana* under water deficit after the treatment with a 250-mM mannitol solution [6, 7]. Aquaporin gene expression varied in a *Vitis* hybrid (*V. berlandieri* × *V. rupestris*) Richter-110 depending on the type of aquaporin and the water stress intensity [12].

The essential differences in PIP2 aquaporin gene expression has been revealed in closely related, but ecologically different *Sium latifolium* L. and *Sium sisaroides* L. The level of mRNA of PIP2 aquaporin was higher in *S. sisaroides* terrestrial plants growing under the conditions of moderate water deficit in comparison with that in aerial-aquatic *S. latifolium* growing in a river near the bank, and it increased when the temperature rose to 35–40 °C [13]. PIP aquaporin gene divergent expressions were shown in tolerant and sensitive genotypes of *Saccharum officinarum* L. under normal and drought stress conditions, pointing to the aquaporin transcription

in this species to be potentially genotype-specific [14], that is especially important for scanning molecular markers for plant breeding.

In our experiments, the genotype-specific regulation of PIP aquaporin gene expression was also revealed in responses of investigated maize hybrids different for drought tolerance to water deficiency. In addition, up-regulation of *PIP2;1* aquaporin gene in maize drought-resistance hybrid Dostatok under 30 % substrate moisture correlated with the essential enhancement in the H<sup>+</sup>-ATPase hydrolytic activity, which was higher about three times in comparison with that in more drought-sensitive hybrid Pereiaslavskii [15]. The obtained data allow us to consider the *PIP2;1* aquaporin gene expression as a molecular marker in maize breeding for drought tolerance.

## REFERENCES

1. Tyerman, S. D., Niemietz, C. M. & Bramley, H. (2002). Plant aquaporins: multi functional water and solute channels with expanding roles. *Plant Cell Environ.*, 25, No. 2, pp. 173-194. PMID: 11841662
2. Maurel, C., Verdoucq, L., Luu, D. T. & Santoni, V. (2008). Plant aquaporins: membrane channels with multiple integrated functions. *Annu. Rev. Plant. Biol.*, 59. pp. 595-624. doi: <https://doi.org/10.1146/annurev.arplant.59.032607.092734>
3. Li, G., Santoni, V. & Maurel, C. (2014). Plant aquaporins: roles in plant physiology. *Biochim. Biophys. Acta.*, 1840, pp.1574-1582. doi: <https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2013.11.004>
4. Chaumont, F., Barrieu, F., Jung, R. & Chrispeels, M. (2000). Plasma membrane intrinsic proteins from maize cluster in two sequence subgroups with differential aquaporin activity. *Plant Physiol.*, 122. pp. 1025-1034. doi: <https://doi.org/10.1104/pp.122.4.1025>
5. Jang, J. Y., Kim, D. G., Kim, Y. O., Kim, J. S. & Kang, H. (2004). An expression analysis of a gene family encoding plasma membrane aquaporins in response to abiotic stresses in *Arabidopsis thaliana*. *Plant Mol. Biol.*, 54, No. 5, pp. 713-725. doi: <https://doi.org/10.1023/B:PLAN.0000040900.61345.a6>
6. Alexandersson, E., Fraysse, L., Sjövall-Larsen, S., Gustavsson, S., Fellert, M., Karlsson, M., Johanson, U. & Kjellbom, P. (2005). Whole gene family expression and drought stress regulation of aquaporins. *Plant Mol. Biol.*, 59. No. 3, pp. 469-484. doi: <https://doi.org/10.1007/s11103-005-0352-1>
7. Chaumont, F., Barrieu, F., Wojcik, E., Chrispeels, M. J. & Jung, R. (2001). Aquaporins constitute a large and highly divergent protein family in maize. *Plant Physiol.*, 125, pp. 1206-1215. PMID: PMC65601
8. Sakurai, J., Ishikawa, F., Yamaguchi, T., Uemura, M. & Maeshima, M. (2005). Identification of 33 rice aquaporin genes and analysis of their expression and function. *Plant Cell Physiol.*, 46, No. 1, pp. 1568-1577. doi: <https://doi.org/10.1093/pcp/pci172>
9. Kapilan, R., Vaziri, M. & Zwiazek, J. J. (2018). Regulation of aquaporins in plants under stress. *Biol Res.*, 51, No. 4. doi: <https://doi.org/10.1186/s40659-018-0152-0>
10. Voizechivska, O. V., Kapustian, A. V., Kosyk, O. I., Musienko, M. M., Olchovich, O. P., Paniuta, O. O., Parshikova, T. V. & Slavni, P. S. (2010). *Plant Physiology: Practicum*. Lutsk: Teren (in Ukrainian).
11. Lian, H. L., Yu, X., Lane, D., Sun, W.-N., Tang, Z.-C. & Su, W.-A. (2006). Upland rice and lowland rice exhibited different PIP expression under water deficit and ABA treatment. *Cell Res.*, 16, pp. 651-660. doi: <https://doi.org/10.1038/sj.cr.7310068>
12. Galmes, J., Pou, A., Alsina, M. M., Tomas, M., Medrano, H. & Flexas, J. (2007). Aquaporin expression in response to different water stress intensities and recovery in Richter-110 (*Vitis* sp.): relationship with ecophysiological status. *Planta*, 226, No. 3, pp. 671-681. doi: <https://doi.org/10.1007/s00425-007-0515-1>
13. Bliuma, D. (2010). PIP2 – aquaporin gene expression of *Sium latifolium* L. under different water supply. *Nauk. zap. Ternop. nac. ped. un-tu., Ser. Biol.*, 45, No. 4, pp. 3-8 (in Ukrainian). doi: <https://doi.org/10.15407/ukrbotj74.01.080>
14. Da Silva, M. D., de Oliveira Silva, R. L., Neto Ferreira, J. R. C., Guimarães, A. C. R., Veiga, D. T., Chabregas, S. M., Burnquist, W. L., Kahl, G., Benko-Iseppon, A. M. & Ederson, A. K. (2013). Expression analysis of sugarcane aquaporin genes under water deficit. *J. Nucleic Acids*, 763945, doi: <https://doi.org/10.1155/2013/763945>

15. Ovrutskaya, I. I. & Bluma, D. A. (2016). Water deficit induces changes in H<sup>+</sup>-ATPase activity and its gene expression in *Zea mays* L. roots. *Dopov. Nac. acad. nauk Ukr.*, 10, pp. 84-87. doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2016.10.084>

Received 28.02.2019

*I.I. Овруцька, Є.Л. Кордюм*

Институт ботаники ім. М.Г. Холодного НАН України, Київ  
E-mail: cellbiol@ukr.net, airin1900@gmail.com

**ЕКСПРЕСІЯ ГЕНА АКВАПОРИНУ *PIP2;1* У РІЗНИХ  
ЗА СТІЙКІСТЮ ДО ПОСУХИ ГІБРИДІВ *ZEA MAYS* L.**

На рівні mRNA показано відмінності в експресії гена *PIP2;1* аквапорину в корнях стійких і чутливих до посухи гібридів кукурудзи при достатній вологості субстрату, а також різні реакції генотипів на водний дефіцит. На підставі одержаних даних експресію гена *PIP2;1* можна розглядати як можливий молекулярний маркер в селекції кукурудзи на посухостійкість.

**Ключові слова:** *Zea mays* L., посухостійкість, експресія гена *PIP2;1*-аквапорин, ПЛР зі зворотною транскрипцією.

*I.I. Овруцкая, Е.Л. Кордюм*

Институт ботаники им. Н.Г. Холодного НАН Украины, Киев  
E-mail: cellbiol@ukr.net, airin1900@gmail.com

**ЭКСПРЕССИЯ ГЕНА АКВАПОРИНА *PIP2;1* У РАЗЛИЧНЫХ  
ПО СТОЙКОСТИ К ЗАСУХЕ ГИБРИДОВ *ZEA MAYS* L.**

На уровне mRNA показаны отличия в экспрессии гена *PIP2;1* аквапорина в корнях стойких и чувствительных к засухе гибридов кукурузы при достаточной влажности субстрата, а также различные реакции генотипов на водный дефицит. Анализ полученных данных позволяет рассматривать экспрессию гена *PIP2;1* в качестве возможного молекулярного маркера в селекции кукурузы на засухоустойчивость.

**Ключевые слова:** *Zea mays* L., засухоустойчивость, экспрессия гена *PIP2;1*-аквапорин, ПЦР с обратной транскрипцией.

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.05.102>

УДК 616.379-008.64-002:577.2

**Т.С. Вацеба<sup>1</sup>, Л.К. Соколова<sup>2</sup>, В.В. Пушкарьов<sup>2</sup>,  
О.І. Ковзун<sup>2</sup>, В.М. Пушкарьов<sup>2</sup>, М.Д. Тронько<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> ДВНЗ “Івано-Франківський національний медичний університет”

<sup>2</sup> ДУ “Інститут ендокринології та обміну речовин ім. В.П. Комісаренка НАМН України”, Київ

E-mail: pushkarev.vm@gmail.com

## **Фосфорилування PRAS40 у лейкоцитах хворих на рак та діабет**

*Представлено членом-кореспондентом НАН України М.Д. Троньком*

*Вивчено активність mTORC1 (mammalian target of rapamycin complex 1) у лейкоцитах хворих на рак та діабет методом імуноферментного аналізу. Показано, що у лейкоцитах хворих на рак та діабет 2-го типу фосфорилування інгібітора mTORC1 – PRAS40 (proline-rich Akt substrate 40kDa) зростає, що свідчить про активацію кінрази, яка відіграє важливу роль у формуванні інсулінорезистентності та прогресії пухлин. Проте у хворих і на рак, і на діабет фосфорилування PRAS40 та, відповідно, активність mTORC1 істотно знижується порівняно з контролем. Обговорюються механізми активації mTORC1 та її значення за умов розвитку раку та діабету.*

**Ключові слова:** діабет 2-го типу, рак, mTORC1, PRAS40.

Протеїнкінназа mTORC1 (mammalian target of rapamycin complex 1) керує ростом клітин та гомеостазом, у тому числі синтезом білка, ліпогенезом, обміном глюкози, аутофагією, біогенезом лізосом, проліферацією та виживанням, у відповідь на сигнали середовища, такі як рівень амінокислот, глюкози, енергії та кисню і фактори росту [1]. Порушення регуляції каскаду PI3K-AKT-mTOR призводить до важких захворювань, таких як рак і діабет 2-го типу (Д2Т).

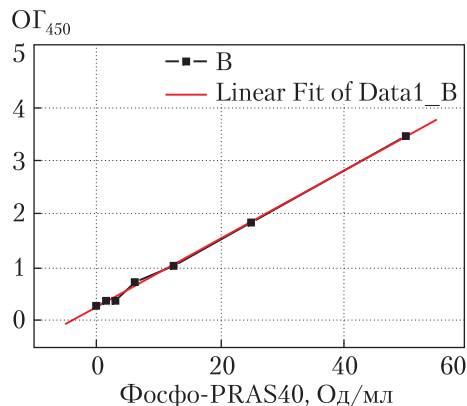
Субстрат Akt1-1 (AKT1S1), більше відомий як багатий на пролін субстрат Akt з масою 40 кДа (PRAS40), є компонентом сигнального каскаду PI3K/Akt/mTORC1. PRAS40 входить до складу mTORC1 і є його негативним регулятором [2]. Підвищений рівень фосфорилування PRAS40 було виявлено в кількох типах пухлин [3]. Також PRAS40 бере участь у регулюванні чутливості до інсуліну [4].

Існують дві ізоформи білка PRAS40 з довжиною поліпептидного ланцюга 276 (ізоформа А) та 256 (ізоформа В) амінокислот. На N-кінці є дві багатих проліном ділянки з ще не визначеною функцією. Далі йдуть дві короткі послідовності: TOS (TOR-сигналінг) і RAIP (названа за її послідовністю) – мотиви, що опосередковують взаємодію з mTORC1 [5]. Обидві ізоформи на карбоксильному кінці білка також містять збагачену лейцином по-

© Т.С. Вацеба, Л.К. Соколова, В.В. Пушкарьов, О.І. Ковзун, В.М. Пушкарьов, М.Д. Тронько, 2019



**Рис. 1.** Калібрувальна крива для визначення фосфорильованого по Тре246 PRAS40



слідовність NES, що відповідає за експорт з ядра [6]. PRAS40 фосфорильється по декількох сайтах. Akt та Pim-1 фосфорильють Thr266/Thr246 (відповідно ізоформи А і В), інші сайти фосфорильовання пов'язані з mTORC1 [7].

Білок експресується повсюдно і виявляється як у цитозолі, так і в ядрі. Транспорт з ядра в цитозоль опосередковується ділянкою NES [6].

PRAS40 діє як інгібітор активності mTORC1. Його фосфорильовання призводить до дисоціації PRAS40 з Raptor в комплексі mTOR, що сприяє активації кінази mTOR [5]. Однак нокаут PRAS40 порушує фосфорильовання субстратів mTORC1 у певних типах клітин, що вказує на важливість PRAS40 для сигналіngu mTORC1 через ще не з'ясовані механізми [8].

За мету дослідження ставилося вивчення активації mTORC1 шляхом фосфорильовання PRAS40 як кінази, що бере участь у патогенезі діабету та раку.

**Матеріали і методи.** Дослідження проводилося на базі відділу діабетології ДУ “Інститут ендокринології та обміну речовин ім. В.П. Комісаренка НАМН України”. Усі пацієнти підписували інформовану згоду на використання біоматеріалів у подальших діагностичних та наукових дослідженнях. Відразу ж після забору кров центрифугували, використовуючи Histopaque 1077 (“Sigma”, США), отримані лейкоцити промивали і заморожували при  $-80^{\circ}\text{C}$  до використання. Для визначення кількості фосфо-PRAS40 (ф-Тре246) використовували набори для імуноферментного аналізу KHO0421 фірми “Invitrogen” (США). Клітини лізували в буфері для екстракції з набору, що містив інгібітори протеаз і фосфатаз. Дослідження проводилися в триплетах. Концентрацію білка в лізаті визначали за допомогою наборів (BCA protein assay kit) фірми “Novagen” (США). Вимірювання проводили на мікропланшетному рідері фірми “Bio-tek Instruments” (США) при довжині хвилі 450 нм.

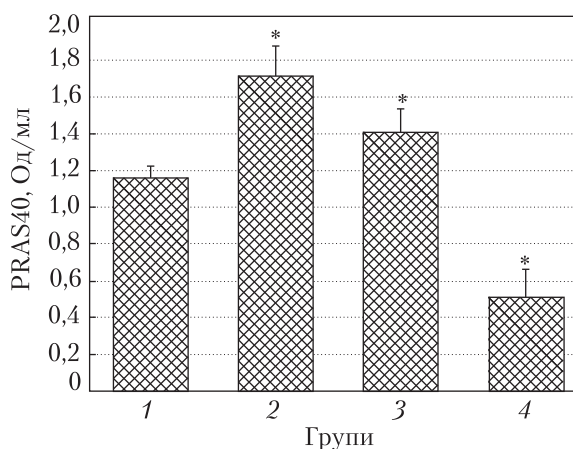
Калібрувальна крива (рис. 1) свідчить про хороше узгодження експериментальної кривої з теоретичною.

Результати експериментів наведені як  $M \pm \text{Std}$ ,  $n = 6 \div 15$ . Для порівняння двох груп даних використовували  $t$ -критерій Стьюдента.

**Результати і обговорення.** Для дослідження були сформовані такі групи: 1, контрольна — здорові люди, репрезентативні за віком; 2 — хворі на Д2Т; 3 — хворі на рак; 4 — хворі на рак та Д2Т.

До складу лейкоцитів входять моноцити/макрофаги (до 11 % загальної кількості лейкоцитів) та лімфоцити (до 40 %), що беруть участь у процесах клітинного та гуморального імунітету. PI3K/Akt/mTORC1 — сигнальний каскад, який значною мірою визначає функціонування цих клітин крові у хворих на діабет та рак [9, 10].

Вміст фосфорильованого PRAS40 вірогідно зростає в лейкоцитах хворих на Д2Т (рис. 2, 2), що свідчить про активацію mTORC1. Кількість фосфо-PRAS40-позитивних препаратів у хворих на Д2Т становить 83,3 %, а у хворих на рак — 66,7 %.



**Рис.2.** Кількість фосфорильованого по Тре246 PRAS40 у хворих на рак та діабет. 1 – контроль ( $n = 6$ ); 2 – хворі на діабет 2-го типу ( $n = 12$ ); 3 – хворі на рак ( $n = 15$ ); 4 – хворі на рак та діабет ( $n = 7$ ).  $M \pm Std$ , \* – відмінності від контрольної групи вірогідні,  $P < 0,05$ .

Фосфорильованого PRAS40 у хворих на Д2Т, напевно, визначається співвідношенням ефектів метформіну та інсуліну, які приймали практично всі хворі. Метформін знижує активність mTORC1 але, з іншого боку, покращує сигналінг інсуліну. Інсулін активує mTORC1 через сигнальний каскад PI3K/Akt/mTORC1 і пригнічує активацію метформіном AMPK [12], яка, в свою чергу, інгібує mTORC1. Підсумковим результатом взаємодії цих препаратів та індукованих ними сигнальних механізмів, очевидно, є посилення фосфорильовання інгібітора mTORC1 – PRAS40.

У лімфоцитах хворих на рак також спостерігали посилення фосфорильовання PRAS40 (див. рис. 2, 3), а отже, і активності mTORC1. Гіперактивація mTORC1 часто відбувається на фоні спорадичного раку. У декількох типах пухлин виявлено підвищення рівня фосфорильовання PRAS40 [13], що пов'язано з посиленням активності кіназ, таких як Akt, Pim-1 та mTORC1. Прискорення трансляції, зумовлене аберантною активацією mTORC1, призводить до збільшення розміру клітин та проліферації – двох загальних ознак раку, а пошук інгібіторів mTORC1 вважається перспективним напрямом для терапії онкологічних захворювань [14]. З цієї точки зору посилення активності mTORC1 у лейкоцитах викликає значний інтерес, оскільки може слугувати діагностичним маркером захворювання.

Деякі функції PRAS40, такі як регуляція реакції нуклеолярного стресу, протеасомної активності та виживаності клітин, дають підставу припустити, що PRAS40 може брати участь у прогресії злоякісних пухлин. Фосфорильований PRAS40-Тре246 може також бути біомаркером для прогнозування чутливості до інгібіторів Akt у разі ракових захворювань [3].

Несподіваним виявилось зниження кількості фосфо-PRAS40 у лейкоцитах хворих і на рак, і на діабет (див. рис. 2, 4). Отже, у хворих останньої групи активність mTORC1 у лейкоцитах може виявитись пригніченою порівняно з контролем та, особливо, з групами хворих на діабет і рак (див. рис. 2, 2 і 3). Ймовірним поясненням такого пригнічення може бути конкуренція за спільні сигнальні механізми. Не виключена також антагоністична взаємодія між двома основними каскадами, що контролюють проліферативні процеси – PI3K/Akt та MAPK. Відомо, що сигнальний шлях MAPK/ERK також може активувати mTORC1 шляхом фосфорильовання як TSC2, так і PRAS40, що призводить до дисоціації з Raptor і сприяє активації mTORC1 [14]. Доведено також, що надлишок інсуліну на фоні Д2Т стимулює проліферативні процеси і злоякісну трансформацію через каскад Ras/MAPK/ERK1/2 [15].



Таким чином, стан фосфорилування PRAS40 у лейкоцитах може свідчити про активність mTORC1 та її субстратів, що може бути важливим для оцінки патологічного процесу та ефективності лікарських препаратів.

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Yang J., Nishihara R., Zhang X. et al. Energy sensing pathways: Bridging type 2 diabetes and colorectal cancer? *J. Diabetes Complications*. 2017. **31**, № 7. P. 1228–1236.
2. Wang H., Zhang Q., Wen Q. et al. Proline-rich Akt substrate of 40kDa (PRAS40): a novel downstream target of PI3k/Akt signaling pathway. *Cell Signal*. 2012. **24**, № 1. P. 17–24.
3. Andersen J.N., Sathyanarayanan S., Di Bacco A. et al. Pathway-based identification of biomarkers for targeted therapeutics: personalized oncology with PI3K pathway inhibitors. *Sci. Transl. Med.* 2010. **2**, № 43. 43ra55. doi: <https://doi.org/10.1126/scitranslmed.3001065>
4. Wiza C., Chadt A., Blumensatt M. et al. Over-expression of PRAS40 enhances insulin sensitivity in skeletal muscle. *Arch. Physiol. Biochem.* 2014. **120**, № 2. P. 64–72.
5. Oshiro N., Takahashi R., Yoshino K. et al. The proline-rich Akt substrate of 40 kDa (PRAS40) is a physiological substrate of mammalian target of rapamycin complex 1. *J. Biol. Chem.* 2007. **282**, № 28. P. 20329–20339.
6. Havel J.J., Li Z., Cheng D., Peng J., Fu H. Nuclear PRAS40 couples the Akt/mTORC1 signaling axis to the RPL11-HDM2-p53 nucleolar stress response pathway. *Oncogene*. 2014. doi: <https://doi.org/10.1038/onc.2014.91>
7. Wiza C., Nascimento E.B.M., Ouwens M.D. AKT1S1 (AKT1 substrate 1 (proline-rich)). *Atlas Genet. Cytogenet. Oncol. Haematol.* 2015. **19**, № 12. P. 679–683.
8. Hong-Brown L.Q., Brown C.R., Kazi A.A. et al. Alcohol and PRAS40 knockdown decrease mTOR activity and protein synthesis via AMPK signaling and changes in mTORC1 interaction. *J. Cell. Biochem.* 2010. **109**, № 6. P. 1172–1184.
9. Dituri F., Mazzocca A., Giannelli G., Antonaci S. PI3K functions in cancer progression, anticancer immunity and immune evasion by tumors. *Clin. Dev. Immunol.* 2011. 947858. doi: <https://doi.org/10.1155/2011/947858>
10. De Oliveira C.E., Oda J.M., Losi Guembarovski R. et al. CC chemokine receptor 5: the interface of host immunity and cancer. *Dis. Markers*. 2014. 126954. doi: <https://doi.org/10.1155/2014/126954>
11. Пушкарев В.М., Соколова Л.К., Пушкарев В.В., Тронько Н.Д. Роль AMPK и mTOR в развитии инсулинорезистентности и диабета 2 типа. Механизм действия метформина (обзор литературы). *Пробл. ендокрин. патології*. 2016. № 3. С. 77–90.
12. Sokolova L.K., Pushkarev V.M., Belchina Y.B., Pushkarev V.V., Tronko N.D. Effect of combined treatment with insulin and metformin on 5'AMP-activated protein kinase activity in lymphocytes of diabetic patients. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2018. № 5. С. 100–104. doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.05.100>
13. Jiang N., Hjorth-Jensen K., Hekmat O. et al. In vivo quantitative phosphoproteomic profiling identifies novel regulators of castration-resistant prostate cancer growth. *Oncogene*. 2015. **34**, № 32. P. 2764–2776. doi: <https://doi.org/10.1038/onc.2014.206>
14. Kim L.C., Cook R.S., Chen J. mTORC1 and mTORC2 in cancer and the tumor microenvironment. *Oncogene*. 2017. **36**, № 16. P. 2191–2201. doi: <https://doi.org/10.1038/onc.2016.363>
15. Пушкарев В.М., Соколова Л.К., Пушкарев В.В., Тронько Н.Д. Биохимические механизмы, связывающие диабет и рак. Действие метформина. *Эндокринология*. 2018. 23, № 2. С. 167–179.

Надійшло до редакції 28.01.2019

#### REFERENCES

1. Yang, J., Nishihara, R., Zhang, X. et al. (2017). Energy sensing pathways: Bridging type 2 diabetes and colorectal cancer? *J. Diabetes Complications*, 31, No. 7, pp. 1228-1236.
2. Wang, H., Zhang, Q., Wen, Q. et al. (2012). Proline-rich Akt substrate of 40kDa (PRAS40): a novel downstream target of PI3k/Akt signaling pathway. *Cell Signal*, 24, No. 1, pp. 17-24.
3. Andersen, J. N., Sathyanarayanan, S., Di Bacco, A. et al. (2010). Pathway-based identification of biomarkers for targeted therapeutics: personalized oncology with PI3K pathway inhibitors. *Sci. Transl. Med.*, 2, No. 43, 43ra55. doi: <https://doi.org/10.1126/scitranslmed.3001065>

4. Wiza, C., Chadt, A., Blumensatt, M. et al. (2014). Over-expression of PRAS40 enhances insulin sensitivity in skeletal muscle. *Arch. Physiol. Biochem.*, 120, No. 2, pp. 64-72.
5. Oshiro, N., Takahashi, R., Yoshino, K. et al. (2007). The proline-rich Akt substrate of 40 kDa (PRAS40) is a physiological substrate of mammalian target of rapamycin complex 1. *J. Biol. Chem.*, 282, No. 28, pp. 20329-20339.
6. Havel, J. J., Li, Z., Cheng, D., Peng, J. & Fu, H. (2014). Nuclear PRAS40 couples the Akt/mTORC1 signaling axis to the RPL11-HDM2-p53 nucleolar stress response pathway. *Oncogene*. doi: <https://doi.org/10.1038/onc.2014.91>
7. Wiza, C., Nascimento, E. B. M. & Ouwens, M. D. (2015). AKT1S1 (AKT1 substrate 1 (proline-rich)). *Atlas Genet. Cytogenet. Oncol. Haematol.*, 19, No. 12, pp. 679-683.
8. Hong-Brown, L. Q., Brown, C. R., Kazi, A. A. et al. (2010). Alcohol and PRAS40 knockdown decrease mTOR activity and protein synthesis via AMPK signaling and changes in mTORC1 interaction. *J. Cell. Biochem.*, 109, No. 6, pp. 1172-1184.
9. Dituri, F., Mazzocca, A., Giannelli, G. & Antonaci, S. (2011). PI3K functions in cancer progression, anticancer immunity and immune evasion by tumors. *Clin. Dev. Immunol.*, 947858. doi: <https://doi.org/10.1155/2011/947858>
10. De Oliveira, C. E., Oda, J. M., Losi Guembarovski, R. et al. (2014). CC chemokine receptor 5: the interface of host immunity and cancer. *Dis. Markers.*, 126954. doi: <https://doi.org/10.1155/2014/126954>
11. Pushkarev, V. M., Sokolova, L. K., Pushkarev, V. V. & Tronko, M. D. (2016). The role of AMPK and mTOR in the development of insulin resistance and type 2 diabetes. The mechanism of metformin action (literature review). *Probl. Endocrin. Pathol.*, No. 3, pp. 77-90 (in Russian).
12. Sokolova, L. K., Pushkarev, V. M., Belchina, Y. B., Pushkarev, V. V. & Tronko, N. D. (2018). Effect of combined treatment with insulin and metformin on 5'AMP-activated protein kinase activity in lymphocytes of diabetic patients. *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.*, No. 5, pp. 100-104. doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.05.100>
13. Jiang, N., Hjorth-Jensen, K., Hekmat, O. et al. (2015). In vivo quantitative phosphoproteomic profiling identifies novel regulators of castration-resistant prostate cancer growth. *Oncogene*, 34, No. 32, pp. 2764-2776. doi: <https://doi.org/10.1038/onc.2014.206>
14. Kim, L. C., Cook, R. S. & Chen, J. (2017). mTORC1 and mTORC2 in cancer and the tumor microenvironment. *Oncogene*, 36, No. 16, pp. 2191-2201. doi: <https://doi.org/10.1038/onc.2016.363>
15. Pushkarev, V. M., Sokolova, L. K., Pushkarev, V. V. & Tronko, M. D. (2018). Biochemical mechanisms connecting diabetes and cancer. Effects of metformin. *Endokrynologia*, 23, No. 2, pp. 167-179 (in Russian).

Received 28.01.2019

*Т.С. Вацеба*<sup>1</sup>, *Л.К. Соколова*<sup>2</sup>, *В.В. Пушкарёв*<sup>2</sup>,  
*О.И. Ковзун*<sup>2</sup>, *В.М. Пушкарёв*<sup>2</sup>, *М.Д. Тронько*<sup>2</sup>

<sup>1</sup> ГВУУ "Ивано-Франковский национальный медицинский университет"

<sup>2</sup> ГУ "Институт эндокринологии и обмена веществ им. В.П. Комиссаренко  
НАМН Украины", Киев

E-mail: pushkarev.vm@gmail.com

#### ФОСФОРИЛИРОВАНИЕ PRAS40 В ЛЕЙКОЦИТАХ БОЛЬНЫХ РАКОМ И ДИАБЕТОМ

Изучена активность mTORC1 (mammalian target of rapamycin complex 1) в лейкоцитах больных раком и диабетом методом иммуноферментного анализа. Показано, что в лейкоцитах больных раком и диабетом 2-го типа фосфорилирование ингибитора mTORC1 — PRAS40 (proline-rich Akt substrate 40kDa) возрастает, что свидетельствует об активации киназы, которая играет важную роль в формировании инсулино-резистентности и прогрессии опухолей. Однако у больных и раком, и диабетом фосфорилирование PRAS40 и, соответственно, активность mTORC1 существенно снижается по сравнению с контролем. Обсуждаются механизмы активации mTORC1 и ее значение при раке и диабете.

**Ключевые слова:** диабет 2-го типа, рак, mTORC1, PRAS40.

T.S. Vatseba <sup>1</sup>, L.K. Sokolova <sup>2</sup>, V.V. Pushkarev <sup>2</sup>,  
O.I. Kovzun <sup>2</sup>, V.M. Pushkarev <sup>2</sup>, M.D. Tronko <sup>2</sup>

<sup>1</sup> Ivano-Frankivsk National Medical University

<sup>2</sup> V.P. Komissarenko Institute of Endocrinology and Metabolism  
of the NAMS of Ukraine”, Kiev

E-mail: pushkarev.vm@gmail.com

#### PHOSPHORYLATION OF PRAS40 IN LEUKOCYTES OF PATIENTS WITH CANCER AND DIABETES

We have studied the activity of mTORC1 (mammalian target of rapamycin complex 1) in leukocytes of patients with cancer and diabetes by immuno-enzyme analysis. It has been shown that, in the leukocytes of patients with cancer and type 2 diabetes, the phosphorylation of the mTORC1 inhibitor – PRAS40 (proline-rich substrate 40kDa) increases, which indicates the activation of kinase, which plays an important role in the formation of the insulin resistance and tumor progression. However, in patients with cancer and diabetes, the phosphorylation of PRAS40 and, accordingly, the activity of mTORC1 are significantly reduced as compared with the control. The mechanisms of mTORC1 activation and its significance for cancer and diabetes are discussed.

**Keywords:** type 2 diabetes, cancer, mTORC1, PRAS40.

## 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. Це правило не поширюється на дійсних членів та членів-кореспондентів НАН України.

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, російською або англійською мовою. Автор зазначає рубрику, в якій має публікуватися повідомлення, індекс за Універсальною десятиковою класифікацією; свою поштову і електронну адресу, номер телефону.

*Обсяг* повідомлення не повинен перевищувати *восьми сторінок журналу* (включаючи список літератури — до 15 поз., таблиці, рисунки — до 4). Текст має бути набраний через 1,5 інтервала, розмір шрифту 14 пт.

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* (обсягом *≈1800 знаків*) подаються українською, російською та англійською мовами з ключовими словами (обов’язково вказати написання прізвищ та ініціалів, назву статті та організації (організацій) трьома мовами, e-mail).

*Списки літератури* (мовою оригіналу та в перекладі на англійську мову) складаються в порядку посилання в тексті (оформлення літературних джерел див. в останніх номерах журналу). При цитуванні опублікованої в журналі статті необхідно вказувати присвоєний цифровий ідентифікатор об’єкта (doi).

Файл статті подається у форматі .doc. Рисунки потрібно подавати окремими файлами: фото і складні графіки зберігати у форматі .eps, .tif, .jpg, .bmp, .png, прості графіки можна подавати у .doc або .xls, .xlsx. Для імен файлів використовувати зрозумілі короткі назви, набрані *латинськими літерами*.

*Статті подаються безпосередньо до редакції або надсилаються на електронну пошту* dorovidinanu@gmail.com

Номери журналу викладаються у відкритому доступі щомісяця на сайті <http://dorovidi-nanu.org.ua>

*Адреса редакції: 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; тел./факс: +38(044)288-03-46).***



## **Засновник**

Національна академія наук України

## **Видавець**

Видавничий дім “Академперіодика”  
НАН України

Свідоцтво про державну  
реєстрацію журналу серія КВ № 8889,  
видане 21 червня 2004 р.

Друкується за рішенням  
редакційної колегії журналу  
№ 5 від 14.05.2019

## **Адреса редакції:**

Україна, 01004, Київ, 4,  
вул. Терещенківська, 3  
Тел. (044) 235-12-16

Інтернет-сторінка:  
<http://dopovidi-nanu.org.ua>  
<http://www.dopovidi.nas.gov.ua>  
(архів 2007–2015)

Редактор  
*Т.І. Хоменко*

Технічний редактор  
*Т.М. Шендерович*

Комп’ютерна верстка  
*В.М. Каніщевої*

Підписано до друку 14.05.2019.  
Формат 84×108/16. Гарн. Петербург.  
Ум. друк. арк. 11,34.  
Обл.-вид. арк. 10,45.  
Тираж 167 прим. Зам. 5616.

Видавець і виготовлювач  
Видавничий дім  
“Академперіодика” НАН України  
01004, Київ, вул. Терещенківська, 4  
Свідоцтво  
про внесення до Держреєстру  
суб’єкта видавничої справи  
серії ДК № 544 від 27.07.2001

## **РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ ЖУРНАЛУ**

### **Головний редактор**

А. Г. НАУМОВЕЦЬ, акад. НАН України  
С. А. АНДРОНАТІ, акад. НАН України; П. І. АНДОН,  
акад. НАН України; А. Г. БІЛОУС, акад. НАН України;  
Я. Б. БЛЮМ, акад. НАН України; В. Л. БОГДАНОВ,  
акад. НАН України, заст. головного редактора з наук. питань;  
А. Ф. БУЛАТ, акад. НАН України; Г. М. ГАВРИЧКОВА,  
заст. головного редактора; П. Ф. ГОЖИК, акад. НАН України;  
В. В. ГОНЧАРУК, акад. НАН України; В. П. ГОРБУЛІН,  
акад. НАН України; В. Т. ГРІНЧЕНКО, акад. НАН України;  
Г. В. ЄЛЬСЬКА, акад. НАН України; А. Г. ЗАГОРОДНІЙ,  
акад. НАН України; М. Ю. ІЛЬЧЕНКО, акад. НАН України;  
М. Т. КАРТЕЛЬ, акад. НАН України; О. В. КИРИЛЕНКО,  
акад. НАН України; С. В. КОМІСАРЕНКО, акад. НАН України;  
В. Г. КОШЕЧКО, акад. НАН України; О. О. КРИШТАЛЬ,  
акад. НАН України; Л. М. ЛОБАНОВ, акад. НАН України;  
В. М. ЛОКТЕВ, акад. НАН України; В. В. МОРГУН,  
акад. НАН України; В. С. ПІДГОРСЬКИЙ, акад. НАН України;  
О. М. ПОНОМАРЕНКО, акад. НАН України;  
А. М. САМОЙЛЕНКО, акад. НАН України; В. І. СТАРОСТЕНКО,  
акад. НАН України; Є. Я. ХРУСЛОВ, акад. НАН України;  
В. Ф. ЧЕХУН, акад. НАН України; М. Ф. ШУЛЬГА,  
акад. НАН України; Я. С. ЯЦКІВ, акад. НАН України

## **EDITORIAL BOARD**

### **Editor-in-chief**

A. G. NAUMOVETS, acad. of the NAS of Ukraine  
S. A. ANDRONATI, acad. of the NAS of Ukraine; P. I. ANDON,  
acad. of the NAS of Ukraine; A. G. BILOUS, acad. of the NAS of  
Ukraine; Ya. B. BLUME, acad. of the NAS of Ukraine;  
V. L. BOGDANOV, acad. of the NAS of Ukraine, Deputy Editor-in-  
chief of Scientific Issues; A. F. BULAT, acad. of the NAS of Ukraine;  
G. M. GAVRYCHKOVA, Deputy Editor-in-chief; P. F. GOZHYK,  
acad. of the NAS of Ukraine; V. V. GONCHARUK, acad. of the NAS  
of Ukraine; V. P. GORBULIN, acad. of the NAS of Ukraine;  
V. T. GRINCHENKO, acad. of the NAS of Ukraine; A. V. JEL'S'KA,  
acad. of the NAS of Ukraine; A. G. ZAGORODNY, acad. of the NAS  
of Ukraine; M. YU. ILCHECHENKO, acad. of the NAS of Ukraine;  
M. T. KARTEL, acad. of the NAS of Ukraine; O. V. KIRILENKO,  
acad. of the NAS of Ukraine; S. V. KOMISARENKO, acad. of the NAS  
of Ukraine; V. G. KOSHECHKO, acad. of the NAS of Ukraine;  
O. O. KRISHTAL, acad. of the NAS of Ukraine; L. M. LOBANOV,  
acad. of the NAS of Ukraine; V. M. LOKTEV, acad. of the NAS  
of Ukraine; V. V. MORGUN, acad. of the NAS of Ukraine;  
V. S. PIDGORSKY, acad. of the NAS of Ukraine;  
O. M. PONOMARENKO, acad. of the NAS of Ukraine;  
A. M. SAMOILENKO, acad. of the NAS of Ukraine;  
V. I. STAROSTENKO, acad. of the NAS of Ukraine;  
E. YA. KHRUSLOV, acad. of the NAS of Ukraine; V. F. CHEKHUN,  
acad. of the NAS of Ukraine; M. F. SHUL'GA, acad. of the NAS  
of Ukraine; YA. S. YATSKIV, acad. of the NAS of Ukraine