



# ДОПОВІДІ НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

## 3 • 2018

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

REPORTS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE

### Зміст

#### МАТЕМАТИКА

*Аноп А.В., Мурач О.О.* Однорідні еліптичні рівняння в розширеній соболевській шкалі... 3

*Макаров В.Л., Пагіря М.М.* Інтерполяція функціоналів інтегральними ланцюговими *C*-дробами... 12

#### ІНФОРМАТИКА

*Кургаєв А.Ф.* Новое определение языка веб-онтологий OWL2... 22

#### МЕХАНІКА

*Назаренко В.М., Кипніс О.Л.* Гранична рівновага кусково-однорідного пружного тіла з міжфазними зсувними тріщинами у кутовій точці межі поділу середовищ... 36

*Хорошун Л.П.* К основам нелинейной теории электроупругости... 43

*Хорошун А.С.* О построении управления поступательным движением вращением эксцентрикового маховика... 53

#### ФІЗИКА

*Руденко Е.М., Сорокін В.М., Короташ І.В., Полоцький Д.Ю., Краковний А.О., Суворов О.Ю., Білоголовський М.О., Пекур Д.В.* Підвищення ефективності тепловідведення від потужних

### Contents

#### MATHEMATICS

*Anop A.V., Murach A.A.* Homogeneous elliptic equations in an extended Sobolev scale... 3

*Makarov V.L., Pahirya M.M.* Interpolation of functionals by integral continued *C*-fractions... 12

#### INFORMATICS

*Kurgaev A.F.* New definition of the web ontology language OWL2... 22

#### MECHANICS

*Nazarenko V.M., Kipnis A.L.* Limit equilibrium of the piece-homogeneous elastic body with interfacial shear cracks at the corner point of the media-separating boundary... 36

*Khoroshun L.P.* To the bases of the nonlinear theory of electroelasticity... 43

*Khoroshun A.S.* On the construction of a control over the translational motion by the rotation of an eccentric flywheel... 53

#### PHYSICS

*Rudenko E.M., Sorokin V.M., Korotash I.V., Polotsky D.Yu., Krakovny A.O., Suvorov O.Yu., Belogolovskii M.A., Pekur D.V.* Enhancement of the efficiency of heat removal from powerful elec-

електронних пристроїв через термічні інтерфейси на основі плівок нітриду алюмінію . . . .	59	tronic devices through thermal interfaces based on aluminum nitride films . . . . .	59
<b>ТЕПЛОФІЗИКА</b>		<b>HEAT PHYSICS</b>	
<i>Басок Б.И., Гоцуленко В.В.</i> Механізми теплогидродинамической неустойчивости при локальном подводе теплоты к газу . . . . .	69	<i>Basok B.I., Gotsulenko V.V.</i> Mechanisms of heat-hydrodynamic instability with local heat supply to gas. . . . .	69
<b>НАУКИ ПРО ЗЕМЛЮ</b>		<b>GEOSCIENCES</b>	
<i>Кушнір С.В.</i> Вплив структурування у воді на тиск її насичених парів та величину поверхневого натягу . . . . .	80	<i>Kushnir S.V.</i> Influence of the structurization of water on the pressure of its saturated vapor and on the surface tension. . . . .	80
<i>Лялько В.І., Єлістратова Л.О., Апостолов О.А., Ходоровський А.Я., Чехний В.М.</i> Експрес-оцінка ерозійно небезпечних ділянок ґрунтового покриву на території України з використанням даних дистанційного зондування Землі з врахуванням кліматичних факторів та рослинності . . . . .	87	<i>Lyalko V.I., Elistratova L.O., Apostolov O.A., Khodorovsky A.Ya., Czechniy V.M.</i> Express-evaluation of potentially erosive soils on the territory of Ukraine, by using the remote sensing data with consideration of climatic factors and vegetation . . . . .	87
<b>ХІМІЯ</b>		<b>CHEMISTRY</b>	
<i>Кір'янчук В.Ф., Демчук З.І., Тарнавчик І.Т., Кінгслі К., Когут А.М., Шевчук О.М., Воронов С.А., Воронов А.С.</i> Кінетика та механізм реакцій вільнорадикальної полімеризації акрилових мономерів на основі тригліцеридів рослинних олій . . . . .	95	<i>Kiryanchuk V.F., Demchuk Z.I., Tarnavchik I.T., Kingsley K., Kohut A.M., Shevchuk O.M., Voronov S.A., Voronov A.S.</i> Kinetics and mechanism of free-radical polymerization reaction of acrylic monomers based on triglycerides of plant oils . . . . .	95
<i>Тітов Ю.О., Білявіна Н.М., Слободяник М.С., Тимошенко М.В., Чумак В.В.</i> Вплив ізовалентного заміщення атомів лантану в $BaLa_4Ti_4O_{15}$ на будову його шаруватої перовськітоподібної структури . . . . .	104	<i>Titov Y.A., Belyavina N.M., Slobodyanik M.S., Timoschenko M.V., Chumak V.V.</i> Influence of the isovalent substitution of La atoms in $BaLa_4Ti_4O_{15}$ on the constitution of its slab perovskite-like structure . . . . .	104
<b>БІОЛОГІЯ</b>		<b>BIOLOGY</b>	
<i>Емельянов В.И., Поляковский С.А., Сакада В.И., Гродзинский Д.М.</i> Растительные клетки формируют свои защитные структуры из молекул фитопатогенных микроорганизмов. . . . .	110	<i>Emelyanov V.I., Polyakovskiy S.A., Sakada V.I., Grodzinskiy D.M.</i> Plant cells formed their protective structures use molecules of phytopathogenic microorganisms . . . . .	110
<b>БІОФІЗИКА</b>		<b>BIOPHYSICS</b>	
<i>Говорова Ю.С., Зінченко О.В., Семенченко О.Ю., Боброва О.М., Нардід Е.О., Нардід О.А.</i> ДСК-дослідження дії фракцій екстрактів плаценти людини на термічну стабільність білкових комплексів еритроцитарних мембран . . . . .	116	<i>Govorova Yu.S., Zinchenko O.V., Semenchenko O.Yu., Bobrova O.M., Nardid E.O., Nardid O.A.</i> DSC investigation of the influence of human placenta fractions on the thermal stability of protein complexes of erythrocyte membranes . . . . .	116

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.03.003>

УДК 517.956.22

**А.В. Аноп, О.О. Мурач**

Інститут математики НАН України, Київ

E-mail: [ahlv@ukr.net](mailto:ahlv@ukr.net), [murach@imath.kiev.ua](mailto:murach@imath.kiev.ua)

## Однорідні еліптичні рівняння в розширеній соболевській шкалі

*Представлено членом-кореспондентом НАН України А.Н. Кочубеєм*

*У розширеній соболевській шкалі досліджено однорідні еліптичні диференціальні рівняння, розв'язки яких задовольняють досить загальні крайові умови. Ця шкала складається з ізотропних гільбертових просторів Хермандера, для яких показником регулярності слугить довільна функція,  $RO$ -змінна на нескінченності за Авакумовичем. Встановлено теореми про характер розв'язності цих рівнянь і локальну регулярність (аж до межі області) їх розв'язків у вказаній шкалі. Дано явний опис усіх гільбертових просторів, інтерполяційних для пар підпросторів гільбертових просторів Соболева, утворених розв'язками однорідного еліптичного рівняння.*

**Ключові слова:** еліптичне рівняння, простір Соболева, простір Хермандера, нетерів оператор, регулярність розв'язку, інтерполяційний простір.

Простори Соболева відіграють фундаментальну роль у теорії еліптичних диференціальних рівнянь. Так, один із основних її результатів — теорема про нетеровість еліптичних крайових задач у підходящих парах соболевських просторів додатного порядку [1, п. 2.4]. У важливому випадку, коли еліптичне рівняння однорідне, висновок цієї теореми є правильним для соболевських просторів довільного дійсного порядку (див., наприклад, [2, розд. 2, п. 7.3] або [3, п. 3.3.1]).

У цій роботі досліджуються питання про розв'язність і властивості розв'язків загальних однорідних еліптичних рівнянь у розширеній соболевській шкалі [4]. Вона складається з гільбертових просторів Хермандера  $H^{\varphi}$  [5, п. 2.2], для яких показником регулярності розподілів є довільна функція  $\varphi: [1, \infty) \rightarrow (0, \infty)$ ,  $RO$ -змінна на нескінченності за В.Г. Авакумовичем [6, додаток 1]. Використання функціонального параметра  $\varphi$  замість числового дає змогу більш тонко охарактеризувати регулярність розподілів, ніж це можливо в рамках шкали соболевських просторів. Важливо, що розширена соболевська шкала отримується методом інтерполяції з функціональним параметром пар гільбертових просторів Соболева і складається з усіх гільбертових просторів, інтерполяційних для цих пар. Отже, вона є найбільш широким класом гільбертових функціональних просторів, на якому можна досліджувати властивості еліптичних рівнянь за допомогою інтерполяції соболевських просторів. Для різних підкласів цієї шкали теореми про розв'язність еліптичних крайових задач

встановлені в [7, 8] і окремо для однорідних еліптичних рівнянь — у [9, 10] (див. також [3, розд. 3, 4] і [11]).

Основні результати роботи — теорема про нетеровість загальної еліптичної крайової задачі для однорідного еліптичного рівняння в розширеній соболевській шкалі і теореми про породжені цією задачею ізоморфізми та локальну регулярність (аж до межі області) її узагальнених розв'язків у цій шкалі. Крім того, у термінах просторів Хермандера дано опис усіх гільбертових просторів, які є інтерполяційними для пар підпросторів гільбертових просторів Соболева, утворених розв'язками однорідного еліптичного рівняння.

**1. Постановка задачі.** Нехай  $\Omega$  — довільна обмежена область у евклідовому просторі  $\mathbf{R}^n$ , де  $n \geq 2$ . Припустимо, що межа  $\Gamma$  цієї області є замкненим (тобто компактним і без краю) многовидом вимірності  $n-1$  класу  $C^\infty$ , причому  $C^\infty$ -структура на  $\Gamma$  породжена простором  $\mathbf{R}^n$ .

В області  $\Omega$  розглядаємо однорідне лінійне диференціальне рівняння

$$Au(x) \equiv \sum_{|\mu| \leq 2q} a_\mu(x) D^\mu u(x) = 0, \quad x \in \Omega, \quad (1)$$

довільного парного порядку  $2q \geq 2$ . Тут і надалі використано такі стандартні позначення:  $\mu := (\mu_1, \dots, \mu_n)$  — мультиіндекс з цілими невід'ємними компонентами,  $|\mu| := \mu_1 + \dots + \mu_n$ ,  $D^\mu := D_1^{\mu_1} \dots D_n^{\mu_n}$ ,  $D_k := i\partial/\partial x_k$ , де  $k \in \{1, \dots, n\}$ ,  $i$  — уявна одиниця, а  $x = (x_1, \dots, x_n)$  — довільна точка простору  $\mathbf{R}^n$ .

Припускаємо, що рівняння (1) є еліптичним на  $\bar{\Omega} := \Omega \cup \Gamma$ , а усі його коефіцієнти  $a_\mu$  є комплекснозначними функціями класу  $C^\infty(\bar{\Omega})$ . Взагалі, у роботі розглядаються комплекснозначні функції і розподіли та комплексні функціональні простори. У випадку, коли  $n = 2$  і всі старші коефіцієнти  $a_\mu$  є дійсними функціями, додатково припускаємо, що диференціальний оператор  $A$  є правильно (або, інакше кажучи, властиво) еліптичним на  $\Gamma$  [2, розд. 2, п. 1.2]. (У протилежному разі це припущення є наслідком еліптичності рівняння (1).)

У роботі досліджуються властивості розв'язків рівняння (1), які задовольняють крайові умови

$$B_j u(x) \equiv \sum_{|\mu| \leq m_j} b_{j,\mu}(x) D^\mu u(x) = g_j(x), \quad x \in \Gamma, \quad j = 1, \dots, q. \quad (2)$$

Тут кожне  $B_j$  — крайовий лінійний диференціальний оператор порядку  $m_j \leq 2q-1$ , заданий на  $\Gamma$ , з коефіцієнтами  $b_{j,\mu} \in C^\infty(\Gamma)$ . Припускаємо, що набір  $B := (B_1, \dots, B_q)$  крайових операторів задовольняє умову накриття (інакше кажучи, умову Я.Б. Лопатинського) щодо  $A$  на  $\Gamma$  [2, розд. 2, п. 1.4]. Отже, крайова задача (1), (2) є еліптичною на  $\Omega$ .

Пов'яжемо з цією задачею відображення  $u \mapsto Bu$ , задане на лінійному просторі усіх функцій  $u \in C^\infty(\bar{\Omega})$  таких, що  $Au = 0$  в  $\Omega$ . Цей простір позначаємо через  $C^\infty(\bar{\Omega}, A)$ . У роботі досліджуються властивості вказаного відображення в підходящих парах гільбертових функціональних просторів.

Для опису області значень оператора, породженого цим відображенням, знадобиться така спеціальна формула Гріна для крайової задачі (1), (2):

$$(Au, v)_\Omega + \sum_{j=1}^q (B_j u, h_j)_\Gamma = (u, A^+ v)_\Omega + \sum_{r=1}^{2q} \left( D_v^{r-1} u, K_r v + \sum_{j=1}^q Q_{j,r}^+ h_j \right)_\Gamma \quad (3)$$

для довільних функцій  $u, v \in C^\infty(\bar{\Omega})$  і  $h_1, \dots, h_q \in C^\infty(\Gamma)$ . Тут вирази  $(\cdot; \cdot)_\Omega$  і  $(\cdot; \cdot)_\Gamma$  позначають скалярні добутки в гільбертових просторах  $L_2(\Omega)$  і  $L_2(\Gamma)$  функцій, квадрати яких інтегровні на  $\Omega$  і  $\Gamma$  відповідно, а також продовження за неперервністю цих скалярних добутків. Окрім того,  $D_\nu := i\partial/\partial_\nu$ , де  $i$  — уявна одиниця, а  $\partial/\partial_\nu$  — похідна за напрямом внутрішньої нормалі до межі  $\Gamma$  області  $\Omega$ . Як звичайно,  $A^+$  — лінійний диференціальний оператор, формально спряжений до  $A$  відносно форми  $(\cdot; \cdot)_\Omega$ . Далі, кожне  $K_r$  — деякий крайовий лінійний диференціальний оператор на  $\Gamma$  з коефіцієнтами класу  $C^\infty(\Gamma)$ , причому  $\text{ord} K_r \leq 2q - r$ . Нарешті, кожне  $Q_{j,r}^+$  — дотичний лінійний диференціальний оператор на  $\Gamma$ , формально спряжений до дотичного лінійного диференціального оператора  $Q_{j,r}$  відносно  $(\cdot; \cdot)_\Gamma$ , а останній оператор узято із зображення крайового диференціального оператора  $B_j$  у вигляді

$$B_j = \sum_{r=1}^{2q} Q_{j,r} D_\nu^{r-1},$$

де покладаємо  $Q_{j,r} := 0$ , якщо  $r > m_j + 1$ . Формула (3) запропонована Б. Лавруком (див., наприклад, [12, теорема 3.1.1]).

З огляду на цю формулу розглянемо в області  $\Omega$  таку крайову задачу:

$$A^+ v(x) = 0, \quad x \in \Omega, \tag{4}$$

$$K_r v(x) + \sum_{j=1}^q Q_{j,r}^+ h_j(x) = \theta_r(x), \quad x \in \Gamma, \quad r = 1, \dots, 2q. \tag{5}$$

Вона містить, крім невідомої функції  $v$ , ще  $q$  невідомих функцій  $h_1, \dots, h_q$  у крайових умовах (5). Ця задача є формально спряженою до задачі (1), (2) відносно формули Гріна (3). Оскільки остання крайова задача еліптична в  $\Omega$ , то і формально спряжена крайова задача (4), (5) еліптична в  $\Omega$  у деякому сенсі [12, теорема 3.1.2].

Позначимо через  $N$  лінійний простір усіх розв'язків  $u \in C^\infty(\bar{\Omega})$  крайової задачі (1), (2) у випадку, коли всі  $g_j = 0$  на  $\Gamma$ . Окрім того, позначимо через  $N_*$  лінійний простір усіх розв'язків  $(v, h_1, \dots, h_q) \in C^\infty(\bar{\Omega}) \times (C^\infty(\Gamma))^q$  крайової задачі (4), (5) у випадку, коли всі  $\theta_r = 0$  на  $\Gamma$ . Оскільки ці задачі еліптичні, простори  $N$  і  $N_*$  скінченновимірні [12, лема 3.4.2]. Позначимо через  $M_*$  лінійний простір усіх векторів  $(h_1, \dots, h_q) \in (C^\infty(\Gamma))^q$  таких, що  $(v, h_1, \dots, h_q) \in N_*$  для деякої функції  $v \in C^\infty(\bar{\Omega})$ . Звісно,  $\dim M_* \leq \dim N_* < \infty$ ; тут може бути строга нерівність  $\dim M_* < \dim N_*$ , як випливає з [13, теорема 13.6.15].

**2. Розширена соболевська шкала** складається з гільбертових просторів Хермандера, для яких показником регулярності розподілів служить довільний функціональний параметр з класу  $RO$ . За означенням, цей клас складається з усіх вимірних за Борелем функцій  $\varphi: [1, \infty) \rightarrow (0, \infty)$ , для яких існують числа  $a > 1$  і  $c \geq 1$  такі, що  $c^{-1} \leq \varphi(\lambda t)/\varphi(t) \leq c$  для довільних  $t \geq 1$  і  $\lambda \in [1, a]$  (числа  $a$  і  $c$  можуть залежати від  $\varphi$ ). Такі функції називають  $RO$ - (або  $OR$ -) змінними на нескінченності. Клас  $RO$  введений В.Г. Авакумовичем у 1936 р. і досить повно вивчений (див., наприклад, [6, додаток 1]).

Нам знадобиться така властивість класу  $RO$  [6, с. 88]: для кожної функції  $\varphi \in RO$  існують числа  $s_0, s_1 \in \mathbf{R}$ ,  $s_0 \leq s_1$ , і  $c_0, c_1 > 0$  такі, що

$$c_0 \lambda^{s_0} \leq \varphi(\lambda t)/\varphi(t) \leq c_1 \lambda^{s_1} \quad \text{для довільних } t \geq 1, \lambda \geq 1. \tag{6}$$

Покладемо

$$\sigma_0(\varphi) := \sup\{s_0 \in \mathbf{R} : \text{виконується лівá нерівність у (6)}\}, \quad (7)$$

$$\sigma_1(\varphi) := \inf\{s_1 \in \mathbf{R} : \text{виконується права нерівність у (6)}\}. \quad (8)$$

Тут  $-\infty < \sigma_0(\varphi) \leq \sigma_1(\varphi) < \infty$ . Числа  $\sigma_0(\varphi)$  і  $\sigma_1(\varphi)$  є відповідно нижнім і верхнім індексами Матушевської функції  $\varphi \in \text{RO}$ .

Клас  $\text{RO}$  є досить широким. Так, до нього належить кожна неперервна функція  $\varphi: [1, \infty) \rightarrow (0, \infty)$  така, що  $\varphi(t) = t^s (\ln t)^{r_1} (\ln \ln t)^{r_2} \dots (\ln \dots \ln t)^{r_k}$  при  $t \gg 1$ ; тут довільно вибрано числа  $k \in \mathbf{N}$  і  $s, r_1, r_2, \dots, r_k \in \mathbf{R}$ . Для неї  $\sigma_0(\varphi) = \sigma_1(\varphi) = s$ .

Нехай  $\varphi \in \text{RO}$ . Дамо означення гільбертового простору Хермандера  $H^\varphi$  спочатку на  $\mathbf{R}^n$ , а потім на  $\Omega$  і  $\Gamma$ .

За означенням, лінійний простір  $H^\varphi(\mathbf{R}^n)$ , де  $n \in \mathbf{N}$ , складається з усіх розподілів  $w \in S'(\mathbf{R}^n)$  таких, що їх перетворення Фур'є  $\hat{w}$  локально інтегровне за Лебегом на  $\mathbf{R}^n$  і задовольняє умову

$$\|w\|_{H^\varphi(\mathbf{R}^n)}^2 := \int_{\mathbf{R}^n} \varphi^2(\langle \xi \rangle) |\hat{w}(\xi)|^2 d\xi < \infty.$$

Тут  $S'(\mathbf{R}^n)$  – лінійний топологічний простір Шварца повільно зростаючих розподілів, заданих в  $\mathbf{R}^n$ , а  $\langle \xi \rangle := (1 + |\xi|^2)^{1/2}$ . У роботі розподіли трактуємо як *антилінійні* неперервні функціонали на просторі  $S'(\mathbf{R}^n)$  основних функцій. Простір  $H^\varphi(\mathbf{R}^n)$  гільбертів і сепарабельний відносно норми  $\|\cdot\|_{H^\varphi(\mathbf{R}^n)}$ . У ньому щільна множина  $C_0^\infty(\mathbf{R}^n)$  фінітних основних функцій.

Простір  $H^\varphi(\mathbf{R}^n)$  – гільбертів випадок простору  $B_{p,k}$ , введеного Л. Хермандером (див. [5, п. 2.2] або [13, п. 10.1]). А саме:  $H^\varphi(\mathbf{R}^n) = B_{p,k}$ , якщо  $p = 2$  і  $k(\xi) = \varphi(\langle \xi \rangle)$  при  $\xi \in \mathbf{R}^n$ . Зауважимо, що у гільбертовому випадку  $p = 2$  простори Хермандера збігаються з просторами, введеними і дослідженими Л.Р. Волевичем і Б.П. Панеяхом [14, §2].

Якщо функція  $\varphi$  степенева, тобто  $\varphi(t) \equiv t^s$  для деякого  $s \in \mathbf{R}$ , то  $H^\varphi(\mathbf{R}^n)$  є гільбертовим простором Соболева  $H^{(s)}(\mathbf{R}^n)$  порядку  $s$ . Узагалі,

$$s_0 < \sigma_0(\varphi) \leq \sigma_1(\varphi) < s_1 \Rightarrow H^{(s_1)}(\mathbf{R}^n) \subset H^\varphi(\mathbf{R}^n) \subset H^{(s_0)}(\mathbf{R}^n), \quad (9)$$

причому обидва вкладення неперервні та щільні.

Клас просторів  $\{H^\varphi(\mathbf{R}^n) : \varphi \in \text{RO}\}$  виділений і досліджений в [4, 3, 15] та названий розширеною соболевською шкалою на  $\mathbf{R}^n$ . Її версії для евклідової області  $\Omega$  і замкнутого многовиду  $\Gamma$  вводяться стандартним чином на основі простору  $H^\varphi(\mathbf{R}^n)$ . Дамо відповідні означення; тепер ціле  $n \geq 2$ .

За означенням, лінійний простір  $H^\varphi(\Omega)$  складається зі звужень в область  $\Omega$  усіх розподілів  $w \in H^\varphi(\mathbf{R}^n)$  і наділений нормою

$$\|u\|_{H^\varphi(\Omega)} := \inf \left\{ \|w\|_{H^\varphi(\mathbf{R}^n)} : w \in H^\varphi(\mathbf{R}^n), w = u \text{ в } \Omega \right\},$$

де  $u \in H^\varphi(\Omega)$ . Простір  $H^\varphi(\Omega)$  гільбертів і сепарабельний відносно цієї норми, причому множина  $C^\infty(\bar{\Omega})$  щільна в ньому.

Лінійний простір  $H^\varphi(\Gamma)$  складається з усіх розподілів  $h \in D'(\Gamma)$ , які в локальних координатах на многовиді  $\Gamma$  дають елементи простору  $H^\varphi(\mathbf{R}^{n-1})$ . Тут, як звичайно,  $D'(\Gamma)$  — лінійний топологічний простір усіх розподілів на  $\Gamma$ . Дамо детальне означення. Виберемо довільним чином скінченний атлас із  $C^\infty$ -структури на многовиді  $\Gamma$ , утворений локальними картами  $\pi_j: \mathbf{R}^{n-1} \leftrightarrow U_j$ , де  $j=1, \dots, p$ . Тут  $\{U_1, \dots, U_p\}$  — відкрите покриття многовиду  $\Gamma$ . Окрім того, виберемо функції  $\chi_j \in C^\infty(\Gamma)$ , де  $j=1, \dots, p$ , які утворюють розбиття одиниці на  $\Gamma$ , підпорядковане умові  $\text{supp } \chi_j \subset U_j$ .

За означенням, лінійний простір  $H^\varphi(\Gamma)$  складається з усіх розподілів  $h \in D'(\Gamma)$  таких, що  $(\chi_j h) \circ \alpha_j \in H^\varphi(\mathbf{R}^{n-1})$  для кожного  $j \in \{1, \dots, p\}$ . Тут розподіл  $(\chi_j h) \circ \alpha_j$  є зображенням розподілу  $\chi_j h$  у локальній карті  $\alpha_j$ . Простір  $H^\varphi(\Gamma)$  наділений нормою

$$\|h\|_{H^\varphi(\Gamma)} := \left( \|(\chi_1 h) \circ \alpha_1\|_{H^\varphi(\mathbf{R}^{n-1})}^2 + \dots + \|(\chi_p h) \circ \alpha_p\|_{H^\varphi(\mathbf{R}^{n-1})}^2 \right)^{1/2},$$

відносно якої є гільбертовим і сепарабельним. Важливо, що цей простір і топологія в ньому не залежать від зазначеного вибору атласу і розбиття одиниці [3, теорема 2.31]. Множина  $C^\infty(\Gamma)$  щільна в  $H^\varphi(\Gamma)$ .

Означені щойно функціональні простори утворюють розширені соболевські шкали  $\{H^\varphi(\Omega): \varphi \in \mathbf{R}\}$  і  $\{H^\varphi(\Gamma): \varphi \in \mathbf{R}\}$  на  $\Omega$  і  $\Gamma$  відповідно. Ці шкали містять у собі гільбертові простори Соболева довільного дійсного порядку. А саме: якщо  $\varphi(t) \equiv t^s$  для деякого  $s \in \mathbf{R}$ , то  $H^\varphi(\Omega) =: H^{(s)}(\Omega)$  і  $H^\varphi(\Gamma) =: H^{(s)}(\Gamma)$  є просторами Соболева порядку  $s$ . Властивість (9) залишається правильною, якщо в ній замінити  $\mathbf{R}^n$  на  $\Omega$  або  $\Gamma$ ; при цьому вкладення стають компактними.

**3. Результати.** Позначимо через  $H^\varphi(\Omega, A)$ , де  $\varphi \in \mathbf{R}$ , лінійний простір усіх розподілів  $u \in H^\varphi(\Omega)$  таких, що  $Au = 0$  в  $\Omega$ . Тут і далі образ  $Au$  розуміємо в сенсі теорії розподілів. Простір  $H^\varphi(\Omega, A)$  наділений нормою з простору  $H^\varphi(\Omega)$  і є повним відносно неї. Оскільки оператор  $A$  еліптичний на  $\bar{\Omega}$ , то  $H^\varphi(\Omega, A) \subset C^\infty(\bar{\Omega})$  [2, розд. 2, теорема 3.2]. Втім,  $H^\varphi(\Omega, A) \not\subset C^\infty(\bar{\Omega})$ . У соболевському випадку, коли  $\varphi(t) \equiv t^s$  для деякого  $s \in \mathbf{R}$ , простір  $H^\varphi(\Omega, A)$  позначаємо через  $H^{(s)}(\Omega, A)$ .

**Теорема 1.** Для кожного параметра  $\varphi \in \mathbf{R}$  лінійний многовид  $C^\infty(\bar{\Omega}, A)$  щільний у просторі  $H^\varphi(\Omega, A)$ , а відображення  $u \mapsto Vu$ , де  $u \in C^\infty(\bar{\Omega}, A)$ , продовжується єдиним чином (за неперервністю) до деякого обмеженого оператора

$$V_A: H^\varphi(\Omega, A) \rightarrow \bigoplus_{j=1}^q H^{\varphi p - m_j - 1/2}(\Gamma) =: \mathbf{H}_\varphi(\Gamma). \quad (10)$$

Цей оператор нетерів. Його ядро дорівнює  $N$ , а область значень складається з усіх векторів  $(g_1, \dots, g_q) \in \mathbf{H}_\varphi(\Gamma)$  таких, що

$$(g_1, h_1)_\Gamma + \dots + (g_q, h_q)_\Gamma = 0 \text{ для довільного } (h_1, \dots, h_q) \in M_*. \quad (11)$$

Індекс оператора (10) дорівнює  $\dim N - \dim M_*$  і не залежить від  $\varphi$ .

У формулі (10) і далі використовується функціональний параметр  $\rho(t) := t$  аргументу  $t \geq 1$ . Це зроблено для того, щоб не писати аргумент  $t$  у позначеннях просторів Хермандера. Отже,  $(\varphi^s)(t) \equiv \varphi(t)t^s$ , де  $s \in \mathbf{R}$ . Звісно, включення  $\varphi \in \mathbf{R}$  і  $\varphi^s \in \mathbf{R}$  еквівалентні, причому  $\sigma_j(\varphi^s) = \sigma_j(\varphi) + s$  для кожного  $j \in \{0, 1\}$ .

З огляду на теорему 1 нагадаємо, що лінійний обмежений оператор  $T: E_1 \rightarrow E_2$ , де  $E_1$  і  $E_2$  — банахові простори, називають нетеровим, якщо його ядро  $\ker T$  і коядро  $E_2/T(E_1)$  скінченновимірні. Якщо оператор  $T$  нетерів, то його область значень  $T(E_1)$  замкнена в  $E_2$ , а індекс  $\text{ind}T := \dim \ker T - \dim(E_2/T(E_1))$  скінченний.

Візначимо також, що у формулі (11) величина  $(g_j, h_j)_\Gamma$ , де  $j \in \{1, \dots, q\}$ , є значенням розподілу  $g_j \in D'(\Gamma)$  на основній функції  $h_j \in C^\infty(\Gamma)$ .

У випадку, коли функція  $\varphi$  правильно змінна на нескінченності і еліптична крайова задача (1), (2) регулярна, теорема 1 доведена В.А. Михайлецем і О.О. Мурачем у [9, теорема 1.1] (див. також монографію [3, п. 3.3]). При цьому для опису області значень оператора  $B_A$  була використана класична формула Гріна. Зокрема, у соболевському випадку, коли  $\varphi(t) \equiv t^s$  і дійсне  $s \notin \{1/2 - k : k \in \mathbf{N}\}$ , ця теорема міститься в результаті Ж.-Л. Ліонса і Е. Мадженеса [2, розд. 2, п. 7.3]. Для нерегулярних еліптичних крайових задач і правильно змінних функцій  $\varphi$  вона встановлена І.С. Чепурухіною [10, теорема 1].

Якщо  $N = \{0\}$  і  $M_* = \{0\}$ , то оператор (10) є ізоморфізмом простору  $H^\varphi(\Omega, A)$  на простір  $\mathbf{H}_\varphi(\Gamma)$ . У загальній ситуації цей оператор породжує ізоморфізм між їх підпросторами скінченної ковимірності. У зв'язку з цим розглянемо розклади просторів, у яких діє оператор (10), у вигляді таких прямих сум (замкнених) підпросторів:

$$H^\varphi(\Omega, A) = N + \{u \in H^\varphi(\Omega, A) : (u, w)_\Omega = 0 \text{ для усіх } w \in N\}, \quad (12)$$

$$\mathbf{H}_\varphi(\Gamma) = M_* + \{(g_1, \dots, g_q) \in \mathbf{H}_\varphi(\Gamma) : \text{виконується (11)}\}. \quad (13)$$

У формулі (12) півторалінійна форма  $(u, w)_\Omega$  коректно означена для довільних функцій  $u \in H^\varphi(\Omega, A)$  і  $w \in C^\infty(\bar{\Omega})$  за формулою

$$(u, w)_\Omega := \lim_{k \rightarrow \infty} (u_k, w)_\Omega,$$

де  $(u_k)_{k=1}^\infty$  — довільна послідовність, яка лежить у  $C^\infty(\bar{\Omega}, A)$  і прямує до  $u$  у просторі  $H^\varphi(\Omega, A)$ . Позначимо через  $P$  і  $Q$  проектори відповідно просторів  $H^\varphi(\Omega, A)$  і  $\mathbf{H}_\varphi(\Gamma)$  на другий доданок у сумах (12) і (13) паралельно першому доданку. Ці проектори (як відображення) не залежать від  $\varphi$ .

**Теорема 2.** Для кожного  $\varphi \in \text{RO}$  звуження оператора (10) на  $P(H^\varphi(\Omega, A))$  є ізоморфізмом підпростору  $P(H^\varphi(\Omega, A))$  на підпростір  $Q(\mathbf{H}_\varphi(\Gamma))$ .

Дослідимо локальну регулярність (аж до межі області) узагальненого розв'язку  $u$  крайової задачі (1), (2). Спочатку дамо його означення. Позначимо через  $S'(\Omega)$  множину звужень в область  $\Omega$  усіх розподілів з простору  $S'(\mathbf{R}^n)$ . Нехай  $g := (g_1, \dots, g_q) \in (D'(\Gamma))^q$ ; розподіл  $u \in S'(\Omega)$  називаємо узагальненим розв'язком крайової задачі (1), (2), якщо  $Au = 0$  в  $\Omega$  (тоді  $u \in H^\varphi(\Omega, A)$  для деякого  $\varphi \in \text{RO}$ ) і  $B_A u = g$ , де  $B_A$  позначає оператор (10).

Нехай  $\Gamma_0$  — довільна відкрита непорожня підмножина многовиду  $\Gamma$ . Позначимо через  $H_{\text{loc}}^\varphi(\Omega, \Gamma_0)$ , де  $\varphi \in \text{RO}$ , лінійний простір усіх розподілів  $u \in S'(\Omega)$  таких, що  $\chi u \in H^\varphi(\Omega)$  для довільної функції  $\chi \in C^\infty(\bar{\Omega})$ , носій якої лежить в  $\Omega \cup \Gamma_0$ . Крім того, позначимо через  $H_{\text{loc}}^\alpha(\Gamma_0)$ , де  $\alpha \in \text{RO}$ , лінійний простір усіх розподілів  $h \in D'(\Gamma)$  таких, що  $\chi h \in H^\alpha(\Gamma)$  для довільної функції  $\chi \in C^\infty(\Gamma)$ , носій якої лежить в  $\Gamma_0$ .

**Теорема 3.** Припустимо, що розподіл  $u \in S'(\Omega)$  є узагальненим розв'язком крайової задачі (1), (2), де



$$g_j \in H_{\text{loc}}^{\varphi\varphi^{-mj-1/2}}(\Gamma_0)$$

для усіх  $j \in \{1, \dots, q\}$  і деякого  $\varphi \in \mathbf{RO}$ . Тоді  $u \in H_{\text{loc}}^{\varphi}(\Omega, \Gamma_0)$ .

Зокрема, якщо  $\Gamma_0 = \Gamma$ , то простори  $H_{\text{loc}}^{\varphi}(\Omega, \Gamma_0)$  і  $H_{\text{loc}}^{\alpha}(\Gamma_0)$  дорівнюють  $H^{\varphi}(\Omega)$  і  $H^{\alpha}(\Gamma)$  відповідно; отже, у цьому випадку висновок теореми 3 стосується глобальної регулярності розв'язку  $u$ , тобто регулярності в усій області  $\Omega$  аж до її межі  $\Gamma$ .

Наскільки нам відомо, теорема 3 (якщо  $\Gamma_0 \neq \Gamma$ ) є новим результатом навіть у соболевському випадку, коли  $\varphi(t) \equiv t^s$  і  $s$  — довільне дійсне число.

На завершення роботи в термінах просторів  $H^{\varphi}(\Omega, A)$ , де  $\varphi \in \mathbf{RO}$ , дамо опис усіх інтерполяційних гільбертових просторів для довільної пари соболевських гільбертових просторів  $H^{(s_0)}(\Omega, A)$  і  $H^{(s_1)}(\Omega, A)$ , де  $s_0 < s_1$ . У цьому зв'язку нагадаємо відповідне означення.

Нехай задано пару гільбертових просторів  $X_0$  і  $X_1$  таку, що  $X_1$  — лінійний многовид у  $X_0$  і вкладення  $X_1 \subset X_0$  неперервне. Гільбертів простір  $H$  називають інтерполяційним для цієї пари, якщо він задовольняє такі дві умови:

1)  $H$  — лінійний многовид у  $X_0$  і виконуються неперервні вкладення  $X_1 \subset H \subset X_0$ ;

2) для довільного лінійного відображення  $T$ , заданого на  $X_0$ , правильна така імплікація: якщо  $T$  є обмеженим оператором на  $X_0$  і звуження відображення  $T$  на  $X_1$  є обмеженим оператором на  $X_1$ , то і звуження відображення  $T$  на  $H$  є обмеженим оператором на  $H$ .

**Теорема 4.** *Нехай числа  $s_0, s_1 \in \mathbf{R}$  такі, що  $s_0 < s_1$ . Гільбертів простір  $H$  є інтерполяційним для пари гільбертових просторів  $H^{(s_0)}(\Omega, A)$  і  $H^{(s_1)}(\Omega, A)$  тоді і лише тоді, коли  $H = H^{\varphi}(\Omega, A)$  з точністю до еквівалентності норм для деякого параметра  $\varphi \in \mathbf{RO}$ , який задовольняє умову (6).*

Нагадаємо, що в умові (6) числа  $c_0$  і  $c_1$  не залежать від  $t$  і  $\lambda$ . Цю умову можна подати в термінах індексів Матушевської функціонального параметра  $\varphi$ . А саме: вона еквівалентна такій парі умов:

i)  $s_0 \leq \sigma_0(\varphi)$ , та, окрім того,  $s_0 < \sigma_0(\varphi)$ , якщо в (7) не досягається супремум;

ii)  $\sigma_1(\varphi) \leq s_1$  та, окрім того,  $\sigma_1(\varphi) < s_1$ , якщо в (8) не досягається інфімум.

Як показано в [15, теорема 2.7], розширена соболевська шкала  $\{H^{\varphi}(\Omega) : \varphi \in \mathbf{RO}\}$  складається з усіх гільбертових просторів, інтерполяційних для пар гільбертових просторів Соболева  $H^{(s_0)}(\Omega)$  і  $H^{(s_1)}(\Omega)$ , де  $-\infty < s_0 < s_1 < \infty$ . Згідно з теоремою 4 ця властивість зберігається для відповідних підпросторів, утворених розподілами, які задовольняють однорідне еліптичне рівняння (1).

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Agranovich M.S. Elliptic boundary problems. *Encycl. Math. Sci. Vol. 79. Partial differential equations, IX*. Berlin: Springer, 1997. P. 1–144.
2. Лионс Ж.-Л., Мадженес Э. Неоднородные граничные задачи и их приложения. Москва: Мир, 1971. 372 с.
3. Mikhailets V.A., Murach A.A. Hörmander spaces, interpolation, and elliptic problems. Berlin, Boston: De Gruyter, 2014. xii+297 p.
4. Михайлец В.А., Мурач А.А. Расширенная соболевская шкала и эллиптические операторы. *Укр. мат. журн.* 2013. **65**, № 3. С. 368–380.
5. Хермандер Л. Линейные дифференциальные операторы с частными производными. Москва: Мир, 1965. 380 с.
6. Сенета Е. Правильно меняющиеся функции. Москва: Наука, 1985. 144 с.

7. Михайлец В.А., Мурач А.А. Уточненные шкалы пространств и эллиптические краевые задачи. II. *Укр. мат. журн.* 2006. **58**, № 3. С. 352–370.
8. Anop A.V., Kasirenko T.M. Elliptic boundary-value problems in Hörmander spaces. *Methods Funct. Anal. Topology.* 2016. **22**, № 4. P. 295–310.
9. Михайлец В.А., Мурач А.А. Регулярная эллиптическая граничная задача для однородного уравнения в двусторонней уточненной шкале пространств. *Укр. мат. журн.* 2006. **58**, № 11. С. 1536–1555.
10. Чепурухіна І.С. Напіводнорідна еліптична задача з додатковими невідомими функціями в крайових умовах. *Допов. Нац. акад. наук. Укр.* 2015. № 7. С. 20–28.
11. Mikhailets V.A., Murach A.A. The refined Sobolev scale, interpolation, and elliptic problems. *Banach J. Math. Anal.* 2012. **6**, № 2. P. 211–281.
12. Kozlov V.A., Maz'ya V.G., Rossmann J. Elliptic boundary value problems in domains with point singularities. Providence: Amer. Math. Soc., 1997. x+414 p.
13. Хермандер Л. Анализ линейных дифференциальных операторов с частными производными. В 4-х т. Т. 2. Дифференциальные операторы с постоянными коэффициентами. Москва: Мир, 1986. 456 с.
14. Волевич Л.Р., Панеях Б.П. Некоторые пространства обобщенных функций и теоремы вложения. *Успехи мат. наук.* 1965. **20**, № 1. С. 3–74.
15. Mikhailets V.A., Murach A.A. Interpolation Hilbert spaces between Sobolev spaces. *Results Math.* 2015. **67**, № 1. P. 135–152.

Надійшло до редакції 07.11.2017

#### REFERENCES

1. Agranovich, M. S. (1997). Elliptic boundary problems. *Encycl. Math. Sci. Vol. 79. Partial differential equations, IX.* Berlin: Springer.
2. Lions, J.-L. & Magenes, E. (1972). *Non-Homogeneous boundary-value problems and applications. Vol. 1.* New York, Heidelberg: Springer.
3. Mikhailets, V. A. & Murach, A. A. (2014). Hörmander spaces, interpolation, and elliptic problems. Berlin, Boston: De Gruyter.
4. Mikhailets, V.A. & Murach, A.A. (2013). Extended Sobolev scale and elliptic operators. *Ukr. Math. J.*, 65, No. 3, pp. 435-447.
5. Hörmander, L. (1963). *Linear partial differential operators.* Berlin: Springer.
6. Seneta, E. (1976). *Regularly varying functions.* Berlin: Springer.
7. Mikhailets, V. A. & Murach, A. A. (2006). Refined scales of spaces and elliptic boundary-value problems. II. *Ukr. Math. J.*, 58, No. 3, pp. 398-417.
8. Anop, A. V. & Kasirenko, T. M. (2016). Elliptic boundary-value problems in Hörmander spaces. *Methods Funct. Anal. Topology*, 22, No. 4, pp. 295-310.
9. Mikhailets, V. A. & Murach, A. A. (2006). Regular elliptic boundary-value problem for homogeneous equation in two-sided refined scale of spaces. *Ukr. Math. J.*, 58, No. 11, pp. 1748-1767.
10. Chepurukhina, I. S. (2015). A semihomogeneous elliptic problem with additional unknown functions in boundary conditions. *Dopov. Nac. akad. nauk. Ukr.*, No. 7, pp. 20-28 (in Ukrainian).
11. Mikhailets, V. A. & Murach, A. A. (2012). The refined Sobolev scale, interpolation, and elliptic problems. *Banach J. Math. Anal.*, 6, No. 2., pp. 211-281.
12. Kozlov, V. A., Maz'ya, V. G. & Rossmann, J. (1997). *Elliptic boundary value problems in domains with point singularities.* Providence: Amer. Math. Soc.
13. Hörmander, L. (1983). *The analysis of linear partial differential operators, vol. II, Differential operators with constant coefficients.* Berlin: Springer.
14. Volevich, L. R. & Paneah B. P. (1965). Certain spaces of generalized functions and embedding theorems. *Russ. Math. Surv.*, 20, No. 1, pp. 1-73.
15. Mikhailets, V. A. & Murach, A. A. (2015). Interpolation Hilbert spaces between Sobolev spaces. *Results Math.* 67, No. 1, pp. 135-152.

Received 07.11.2017

*A.V. Anop, A.A. Murach*

Институт математики НАН Украины, Киев  
E-mail: ahlv@ukr.net, murach@imath.kiev.ua

#### ОДНОРОДНЫЕ ЭЛЛИПТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ В РАСШИРЕННОЙ СОБОЛЕВСКОЙ ШКАЛЕ

В расширенной соболевской шкале исследованы однородные эллиптические дифференциальные уравнения, решения которых удовлетворяют общим краевым условиям. Эта шкала состоит из изотропных гильбертовых пространств Хермандера, для которых показателем регулярности служит произвольная функция,  $\text{RO}$ -меняющаяся на бесконечности по Авакумовичу. Установлены теоремы о характере разрешимости этих уравнений и локальной регулярности (вплоть до границы области) их решений в указанной шкале. Дано явное описание всех гильбертовых пространств, интерполяционных для пар подпространств гильбертовых пространств Соболева, образованных решениями однородного эллиптического уравнения.

**Ключевые слова:** эллиптическое уравнение, пространство Соболева, пространство Хермандера, нетеров оператор, регулярность решения, интерполяционное пространство.

*A.V. Anop, A.A. Murach*

Institute of Mathematics of the NAS of Ukraine, Kiev  
E-mail: ahlv@ukr.net, murach@imath.kiev.ua

#### HOMOGENEOUS ELLIPTIC EQUATIONS IN AN EXTENDED SOBOLEV SCALE

In an extended Sobolev scale, we investigate homogeneous elliptic differential equations, whose solutions satisfy general enough boundary conditions. This scale consists of isotropic Hilbertian Hörmander spaces for which the regularity index is an arbitrary function  $\text{RO}$ -varying at infinity in the sense of Avakumović. We establish theorems on the character of solvability of these equations and the local regularity (up to the boundary of the domain) of their solutions in the scale indicated. We give an explicit description of all Hilbert spaces that are interpolation ones for pairs of subspaces of Hilbert Sobolev spaces formed by solutions of a homogeneous elliptic equation.

**Keywords:** elliptic equation, Sobolev space, Hörmander space, Fredholm operator, regularity of a solution, interpolation space.

**В.Л. Макаров<sup>1</sup>, М.М. Пагіря<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Інститут математики НАН України, Київ

<sup>2</sup> Мукачівський державний університет, Мукачево

E-mail: makarovimath@gmail.com, pahirya@gmail.com

## Інтерполяція функціоналів інтегральними ланцюговими С-дробами

*Представлено академіком НАН України В.Л. Макаровим*

*Досліджено задачу інтерполяції функціонала інтегральним ланцюговим С-дробом, коли відомі його значення на континуальній множині вузлів. Знайдено необхідні та достатні умови її розв'язності. У частковому випадку такий інтегральний ланцюговий дріб містить у собі інтерполяційний ланцюговий С-дріб, що використовується для наближення функцій однієї змінної.*

**Ключові слова:** континуальні вузли, інтегральні ланцюгові С-дроби, інтерполяція функціоналів.

Узагальненням теорії інтерполяції функцій дійсної (комплексної) змінної на функціонали та оператори в абстрактних просторах присвячено велику кількість робіт, зокрема [1, 2]. Ланцюгові дроби [3] та гіллясті ланцюгові дроби, які ввів у розгляд В.Я. Скоробогатько [4], були узагальнені інтегральними ланцюговими дробами, запропонованими М.С. Сявавком [5]. Інтерполяція інтегральними ланцюговими дробами (ІЛД) була вперше розглянута в роботі [6], подальші розширення та узагальнення результатів цієї роботи містяться у статті [7]. Ще один клас інтерполяційних інтегральних ланцюгових дроби (ПІЛД) досліджено в роботі [8]. Цей клас відрізняється від ІЛД, які вивчалися в попередніх роботах, тим, що  $n$ -й поверх дроби містить не однократний, а  $n$ -кратний інтеграл. Інтерполяційні інтегральні операторні ланцюгові дроби в банахових просторах досліджувалися у статті [9]. Природним узагальненням класичного ланцюгового дроби Тіле є ПІЛД типу Тіле, який розглянуто в наукових працях [10–12].

Метою даної роботи є інтерполяція функціонала, заданого на множині континуальних вузлів, інтегральними ланцюговими С-дробами. У частковому випадку такий ІЛД містить у собі інтерполяційний ланцюговий С-дріб (С-ІЛД), тому він є узагальненням одного з типів ланцюгових дроби, що використовуються для інтерполяції функцій [13].

**Постановка задачі.** Нехай функції  $x(z), x_i(z) \in C[0, 1]$ ,  $i = 0, n$ , де  $x_i(z) \neq x_j(z)$ , є фіксованими елементами з  $C[0, 1]$ ,  $F(x(\cdot))$  – деякий функціонал, визначений у просторі кусково-неперервних функцій  $Q[0, 1]$ . Утворимо континуальні вузли

$$x^0(z) = x_0(z), x^i(z, \xi) = x_0(z) + H(z - \xi)(x_i(z) - x_0(z)), \quad i = \overline{1, n}, \quad (1)$$

де  $0 \leq \xi \leq 1$ ,  $H(\cdot)$  – функція Гевісайда.

Нехай  $b_0, a_i, b_i, i = \overline{1, n}$ , — це числа, функції, оператори, функціонали тощо. Скінченний ланцюговий дріб [3]

$$D_n = b_0 + \frac{a_1}{b_1 + \frac{a_2}{b_2 + \dots + \frac{a_n}{b_n}}}$$

будемо коротко записувати так:

$$D_n = b_0 + \frac{a_1}{b_1 + b_2 + \dots + b_n}.$$

Нехай  $\mathcal{R} \subset \mathbb{R}$  є компакт,  $R = \{x_i : x_i \in \mathcal{R}, x_i \neq x_j, i, j = \overline{0, n}\}$  і функція  $f \in C(\mathcal{R})$  визначена своїми значеннями в точках множини  $R$ ,  $y_i = f(x_i), i = \overline{0, n}$ . За множиною значень  $\{y_i\}$  функцію  $f$  можна інтерполювати різними способами, наприклад, многочленами, сплайнами, ланцюговими дробами. В монографії [14] досліджувалася задача інтерполювання функцій С-ІЛД

$$D_n^{(c)} = a_0^{(c)} + \frac{a_1^{(c)}(x-x_0)}{1} + \frac{a_2^{(c)}(x-x_1)}{1} + \dots + \frac{a_n^{(c)}(x-x_{n-1})}{1}, \quad (2)$$

коефіцієнти якого визначаються через інтерполяційні вузли  $R$  і множину значень функції  $\{y_i\}$  за допомогою рекурентного співвідношення у вигляді скінченного ланцюгового дроби

$$a_k^{(c)} = \frac{1}{x_k - x_{k-1}} \left( -1 + \frac{a_{k-1}^{(c)}(x_k - x_{k-2})}{-1} + \dots + \frac{a_2^{(c)}(x_k - x_1)}{-1} + \frac{a_1^{(c)}(x_k - x_0)}{y_k - y_0} \right), k = \overline{2, n}, \quad (3)$$

$$a_0^{(c)} = y_0, \quad a_1^{(c)} = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}.$$

Якщо всі інтерполяційні вузли  $x_i, i = \overline{0, n}$ , прямують до одного й того ж значення  $x_* \in \mathcal{R}$ , то С-ІЛД (2) перетворюється на правильний ланцюговий С-дріб, відповідний степеневому ряду, в який була розвинута функція  $f$  в околі точки  $x_*$ .

Розглянемо множину ІЛД вигляду

$$Q_n(x(\cdot), \xi) = a_0 + \frac{\int_0^1 a_1(z_1)[x(z_1) - x_0(z_1)] dz_1}{1} + \frac{\int_0^1 a_2(z_2)[x(z_2) - x^1(z_2, \xi)] dz_2}{1} + \dots + \frac{\int_0^1 a_{n-1}(z_{n-1})[x(z_{n-1}) - x^{n-2}(z_{n-1}, \xi)] dz_{n-1}}{1} + \frac{\int_0^1 a_n(z_n)[x(z_n) - x^{n-1}(z_n, \xi)] dz_n}{1},$$

де  $a_0, a_1(z), \dots, a_n(z)$  — деякі ядра.

Сформулюємо інтерполяційну задачу: в множині ІЛД (4) знайти такий ланцюговий дріб, який на континуальних вузлах (1) задовольняє інтерполяційні умови

$$F(x_0(\cdot)) = Q_n(x_0(\cdot), \xi), \quad F(x^i(\cdot, \xi)) = Q_n(x^i(\cdot, \xi), \xi), \quad i = \overline{1, n}, \quad \forall \xi \in [0, 1] \quad (5)$$

і який, як частковий випадок, містить у собі С-ІЛД (2). Такий ІЛД назовемо інтегральним інтерполяційним ланцюговим С-дробом (С-ПЛД).

**Інтерполяція функціоналів інтегральним інтерполяційним ланцюговим С-дробом.** Визначимо ядра  $a_0, a_1(z), \dots, a_n(z)$  з умови, що С-ПЛД (4) задовольняє (5). Зауважимо, що з (4), (5) безпосередньо можна одержати вираз

$$Q_n(x^k(\cdot, \xi), \xi) = a_0 + \frac{\int_0^1 a_1(z_1)[x^k(z_1, \xi) - x_0(z_1)] dz_1}{1} + \frac{\int_0^1 a_2(z_2)[x^k(z_2, \xi) - x^1(z_2, \xi)] dz_2}{1} + \dots + \frac{\int_0^1 a_k(z_k)[x^k(z_k, \xi) - x^{k-1}(z_k, \xi)] dz_k}{1}, \quad k = \overline{0, n}. \quad (6)$$

**Теорема 1.** Нехай функціонал  $F(x(\cdot))$  диференційований за Гато  $(n-1)$  разів і нижченаведені формули мають сенс. Для того щоб С-ПЛД (4) задовольняв інтерполяційні умови (5), необхідно, щоб його ядра визначалися за формулами

$$a_k(\xi) = \frac{-1}{x_k(\xi) - x_{k-1}(\xi)} \frac{d}{d\xi} \left( \frac{\int_0^1 a_{k-1}(z_{k-1})[x^k(z_{k-1}, \xi) - x^{k-2}(z_{k-1}, \xi)] dz_{k-1}}{-1} + \frac{\int_0^1 a_{k-2}(z_{k-2})[x^k(z_{k-2}, \xi) - x^{k-3}(z_{k-2}, \xi)] dz_{k-2}}{-1} + \dots + \frac{\int_0^1 a_2(z_2)[x^k(z_2, \xi) - x^1(z_2, \xi)] dz_2}{-1} + \frac{\int_0^1 a_1(z_1)[x^k(z_1, \xi) - x_0(z_1)] dz_1}{F(x^k(\cdot, \xi)) - F(x_0(\cdot))} \right), \quad k = \overline{2, n}, \quad (7)$$

$$a_0 = F(x_0(\cdot)), \quad a_1(\xi) = \frac{-1}{x_1(\xi) - x_0(\xi)} \frac{d}{d\xi} F(x^1(\cdot, \xi)).$$

**Доведення.** Для  $k=0, 1$  формули є очевидними. Для  $k=m$  із (5), (6) отримуємо

$$F(x^m(\cdot, \xi)) = a_0 + \frac{\int_0^1 a_1(z_1)[x^m(z_1, \xi) - x_0(z_1)] dz_1}{1} + \frac{\int_0^1 a_2(z_2)[x^m(z_2, \xi) - x^1(z_2, \xi)] dz_2}{1} + \dots + \frac{\int_0^1 a_{m-1}(z_{m-1})[x^m(z_{m-1}, \xi) - x^{m-2}(z_{m-1}, \xi)] dz_{m-1}}{1} + \frac{\int_0^1 a_m(z_m)[x^m(z_m, \xi) - x^{m-1}(z_m, \xi)] dz_m}{1}.$$

Послідовно обертаючи ланцюговий дріб, одержимо

$$\int_{\xi}^1 a_m(z_m)[x^m(z_m, \xi) - x^{m-1}(z_m, \xi)] dz_m + 1 = \frac{\int_0^1 a_{m-1}(z_{m-1})[x^m(z_{m-1}, \xi) - x^{m-2}(z_{m-1}, \xi)] dz_{m-1}}{-1} +$$

$$+ \dots + \frac{\int_0^1 a_2(z_2)[x^m(z_2, \xi) - x^1(z_2, \xi)] dz_2}{-1} + \frac{\int_0^1 a_1(z_1)[x^m(z_1, \xi) - x_0(z_1)] dz_1}{F(x^m(\cdot, \xi)) - F(x_0(\cdot))}.$$

Диференціюючи за змінною  $\xi$  обидві частини цього співвідношення, приходимо до формули (7).

**Теорема 2.** *Нехай*

$$F(x(\cdot)) = f\left(\int_0^1 x(t) dt\right) \quad (8)$$

і ядра  $C$ -ІЛД (4) визначаються за формулами (7). Для того щоб  $C$ -ІЛД задовольняв інтерполяційні умови (5), достатньо, щоб функція

$$f(s) \in C^{(n-1)}(-\infty, +\infty).$$

**Доведення.** Нехай ядра визначаються за формулами (7). Для  $k=0, 1$  із (6) безпосередньо випливає, що  $Q_n(x_0(\cdot), \xi) = F(x_0(\cdot))$ ,  $Q_n(x^1(\cdot, \xi), \xi) = F(x^1(\cdot, \xi)) \forall \xi \in [0, 1]$ . Для  $k=2$  із (6) отримаємо

$$Q_2(x^2(\cdot, \xi), \xi) = a_0 + \frac{\int_0^1 a_1(z_1)[x^2(z_1, \xi) - x_0(z_1)] dz_1}{1 + \int_0^1 a_2(z_2)[x^2(z_2, \xi) - x^1(z_2, \xi)] dz_2}. \quad (9)$$

Підставимо значення ядра  $a_2(z_2)$  і знайдемо знаменник дробу:

$$P_2 = 1 + \int_0^1 a_2(z_2)[x^2(z_2, \xi) - x^1(z_2, \xi)] dz_2 = 1 - \int_{\xi}^1 \frac{d}{dz_2} \left( \frac{\int_0^1 a_1(z_1)[x_2(z_1) - x_0(z_1)] dz_1}{F(x^2(\cdot, \xi)) - F(x_0(\cdot))} \right) dz_2 =$$

$$= 1 - \lim_{z_2 \rightarrow 1} K_2[z_2, x_2] + \frac{\int_0^1 a_1(z_1)[x_2(z_1) - x_0(z_1)] dz_1}{F(x^2(\cdot, \xi)) - F(x_0(\cdot))},$$

де

$$K_2[z_2, x_2] = \frac{\int_0^1 a_1(z_1)[x_2(z_1) - x_0(z_1)] dz_1}{F(x^2(\cdot, z_2)) - F(x_0(\cdot))}.$$

Застосовуючи правило Лопіталя і враховуючи (7), (8), одержуємо

$$\begin{aligned} \lim_{z_2 \rightarrow 1} K_2[z_2, x_2] &= - \lim_{z_2 \rightarrow 1} \frac{a_1(z_2)[x_2(z_2) - x_0(z_2)]}{\frac{d}{dz_2} F(x^2(\cdot, z_2))} = \lim_{z_2 \rightarrow 1} \frac{a_1(z_2)}{a_1(z_2)|_{x_1(z_2) \rightarrow x_2(z_2)}} = \\ &= \lim_{z_2 \rightarrow 1} \frac{x_2(z_2) - x_0(z_2)}{x_1(z_2) - x_0(z_2)} \frac{f' \left( \int_0^1 x^1(t, z_2) dt \right) (x_0(z_2) - x_1(z_2))}{f' \left( \int_0^1 x^2(t, z_2) dt \right) (x_0(z_2) - x_2(z_2))} = 1, \quad \forall x_2(z_2). \end{aligned} \quad (10)$$

Підставимо знайдене значення границі  $K_2[z_2, x_2]$  у вираз для  $P_2$ , який у подальшому підставимо в (9). У результаті одержимо  $Q_n(x^2(\cdot, \xi), \xi) = F(x^2(\cdot, \xi))$ . Нехай  $k = 3$ . Із (6) отримуємо співвідношення

$$Q_n(x^3(\cdot, \xi), \xi) = F(x^0(\cdot)) + \frac{\int_0^1 a_1(z_1)[x^3(z_1, \xi) - x_0(z_1)] dz_1}{1} + \frac{\int_0^1 a_2(z_2)[x^3(z_2, \xi) - x^1(z_2, \xi)] dz_2}{1 + \int_0^1 a_3(z_3)[x^3(z_3, \xi) - x^2(z_3, \xi)] dz_3}.$$

Підставимо значення ядра  $a_3(z_3)$  і обчислимо значення останнього знаменника:

$$\begin{aligned} P_3 &= 1 + \int_0^1 a_3(z_3)[x^3(z_3, \xi) - x^2(z_3, \xi)] dz_3 = \\ &= 1 - \int_{\xi}^1 \frac{d}{dz_3} \left\{ \frac{\int_0^1 a_2(z_2)[x^3(z_2, z_3) - x^1(z_2, z_3)] dz_2}{\int_0^1 a_1(z_1)[x^3(z_1, z_2) - x_0(z_1)] dz_1} \right\} dz_3 = \\ &= 1 - \lim_{z_3 \rightarrow 1} K_3[z_3, x_3] + \frac{\int_{\xi}^1 a_2(z_2)[x_3(z_2) - x_1(z_2)] dz_2}{-1} + \frac{\int_{\xi}^1 a_1(z_1)[x_3(z_1) - x_0(z_1)] dz_1}{F(x^3(\cdot, \xi)) - F(x_0(\cdot))}, \end{aligned}$$

де

$$K_3[z_3, x_3] = \frac{\int_{z_3}^1 a_2(z_2)[x_3(z_2) - x_1(z_2)] dz_2}{-1} + \frac{\int_{z_3}^1 a_1(z_1)[x_3(z_1) - x_0(z_1)] dz_1}{F(x^3(\cdot, z_3)) - F(x_0(\cdot))}.$$



Застосовуючи правило Лопіталя, з урахуванням (10), одержуємо

$$\begin{aligned} & \lim_{z_3 \rightarrow 1} K_3[z_3, x_3] = \\ & = \lim_{z_3 \rightarrow 1} \frac{a_2(z_3)[x_3(z_3) - x_1(z_3)]}{\frac{a_1(z_3)[x_3(z_3) - x_0(z_3)]}{F(x^3(\cdot, z_3)) - F(x_0(\cdot))} + \frac{\int_0^1 a_1(z_1)[x_3(z_1) - x_0(z_1)] dz_1}{(F(x^3(\cdot, z_3)) - F(x_0(\cdot)))^2} \frac{d}{dz_3} F(x^3(\cdot, z_3))} = \\ & = \lim_{z_3 \rightarrow 1} \frac{x_3(z_3) - x_1(z_3)}{x_2(z_3) - x_1(z_3)} \frac{a_1(z_3)[x_2(z_3) - x_0(z_3)] + \frac{d}{dz_3} F(x^2(\cdot, z_3))}{a_1(z_3)[x_3(z_3) - x_0(z_3)] + \frac{d}{dz_3} F(x^3(\cdot, z_3))} \frac{F(x^3(\cdot, z_3)) - F(x_0(\cdot))}{F(x^2(\cdot, z_3)) - F(x_0(\cdot))} = \\ & = \lim_{z_3 \rightarrow 1} \left\{ \lim_{z_3 \rightarrow 1} \frac{x_3(z_3) - x_1(z_3)}{x_2(z_3) - x_1(z_3)} \frac{\frac{d}{dz_3} F(x^3(\cdot, z_3))}{\frac{d}{dz_3} F(x^2(\cdot, z_3))} \times \right. \\ & \left. \times \frac{[x_2(z_3) - x_0(z_3)] \frac{d}{dz_3} F(x^1(\cdot, z_3)) - [x_1(z_3) - x_0(z_3)] \frac{d}{dz_3} F(x^2(\cdot, z_3))}{[x_3(z_3) - x_0(z_3)] \frac{d}{dz_3} F(x^1(\cdot, z_3)) - [x_1(z_3) - x_0(z_3)] \frac{d}{dz_3} F(x^3(\cdot, z_3))} \right\}. \end{aligned}$$

Використавши (8) та теорему Лагранжа про скінченні прирости, отримаємо

$$\begin{aligned} \lim_{z_3 \rightarrow 1} K_3[z_3, x_3] & = \lim_{z_3 \rightarrow 1} \frac{x_3(z_3) - x_1(z_3)}{x_2(z_3) - x_1(z_3)} \frac{f''(\theta_1) \left( \int_0^1 x^1(s, z_3) ds - \int_0^1 x^2(s, z_3) ds \right)}{f''(\theta_2) \left( \int_0^1 x^1(s, z_3) ds - \int_0^1 x^3(s, z_3) ds \right)} = \\ & = \lim_{z_3 \rightarrow 1} \frac{a_2(z_3)}{a_2(z_3)|_{x_2(z_3) \rightarrow x_3(z_3)}} = 1, \quad \forall x_3(z_3), \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} \theta_1 & = \int_0^1 x^1(s, z_3) ds + \tau_1 \left( \int_0^1 x^2(s, z_3) ds - \int_0^1 x^1(s, z_3) ds \right), \\ \theta_2 & = \int_0^1 x^1(s, z_3) ds + \tau_2 \left( \int_0^1 x^3(s, z_3) ds - \int_0^1 x^1(s, z_3) ds \right), \quad \tau_1, \tau_2 \in (0, 1). \end{aligned}$$

У загальному випадку для  $k = m$  із (6) маємо

$$\begin{aligned}
 Q_n(x^m(\cdot, \xi), \xi) = & F(x_0(\cdot)) + \frac{\int_0^1 a_1(z_1)[x^m(z_1, \xi) - x_0(z_1)] dz_1}{1} + \\
 & + \frac{\int_0^1 a_2(z_2)[x^m(z_2, \xi) - x^1(z_2, \xi)] dz_2}{1} + \dots + \\
 & + \frac{\int_0^1 a_{m-1}(z_{m-1})[x^m(z_{m-1}, \xi) - x^{m-2}(z_{m-1}, \xi)] dz_{m-1}}{1} + \\
 & + \frac{\int_0^1 a_m(z_m)[x^m(z_m, \xi) - x^{m-1}(z_m, \xi)] dz_m}{1}.
 \end{aligned} \tag{11}$$

Знайдемо значення знаменника

$$P_m = 1 + \int_0^1 a_m(z_m)[x^m(z_m, \xi) - x^{m-1}(z_m, \xi)] dz_m.$$

Для цього підставимо в нього значення  $a_m(z_m)$  з формули (7). Тоді

$$\begin{aligned}
 P_m = & 1 - \int_{\xi}^1 \frac{d}{dz_m} \left( \frac{\int_0^1 a_{m-1}(z_{m-1})[x^m(z_{m-1}, z_m) - x^{m-2}(z_{m-1}, z_m)] dz_{m-1}}{-1} + \dots + \right. \\
 & \left. + \frac{\int_0^1 a_2(z_2)[x^m(z_2, z_m) - x^1(z_2, z_m)] dz_2}{-1} + \frac{\int_0^1 a_1(z_1)[x^m(z_1, z_m) - x_0(z_1)] dz_1}{F(x^m(\cdot, \xi)) - F(x_0(\cdot))} \right) dz_m = \\
 = & 1 - \lim_{z_m \rightarrow 1} K_m[z_m, x_m] + \frac{\int_{\xi}^1 a_{m-1}(z_{m-1})[x_m(z_{m-1}) - x_{m-2}(z_{m-1})] dz_{m-1}}{-1} + \\
 & + \dots + \frac{\int_{\xi}^1 a_2(z_2)[x_m(z_2) - x_1(z_2)] dz_2}{-1} + \frac{\int_{\xi}^1 a_1(z_1)[x_m(z_1) - x_0(z_1)] dz_1}{F(x^m(\cdot, \xi)) - F(x_0(\cdot))},
 \end{aligned}$$

де

$$K_m[z_m, x_m] = \frac{\int_{z_m}^1 a_{m-1}(z_{m-1})[x_m(z_{m-1}) - x_{m-2}(z_{m-1})] dz_{m-1}}{-1} + \dots +$$

$$+ \frac{\int_{z_m}^1 a_2(z_2)[x_m(z_2) - x_1(z_2)] dz_2}{-1} + \frac{\int_{z_m}^1 a_1(z_1)[x_m(z_1) - x_0(z_1)] dz_1}{F(x^m(\cdot, z_m)) - F(x_0(\cdot))}.$$

Аналогічно доводимо, що

$$\lim_{z_m \rightarrow 1} K_m[z_m, x_m] = \lim_{z_m \rightarrow 1} \frac{a_{m-1}(z_m)}{a_{m-1}(z_m)|_{x_{m-1}(z_m) \rightarrow x_m(z_m)}} = 1, \quad \forall x_m(z_m).$$

Підставивши знайдене значення  $P_m$  в (11), отримаємо бажаний результат, а саме  $Q_n(x^m(\cdot, \xi), \xi) = F(x^m(\cdot, \xi))$ . У загальному випадку вказане твердження можна довести за тією ж схемою, що й для випадку  $k = 2, 3$ , але через громіздкість викладок повне доведення не наводитимемо.

**Зауваження.** Умова (8) із формулювання теореми 2 може бути змінена на більш загальну, якщо використати результати робіт [14, 15].

**Теорема 3.** Нехай виконуються умови теореми 2 і  $\xi = 0$ ,  $x(z) \equiv x$ ,  $x_i(z) \equiv x_i$ ,  $i = \overline{0, n}$ . Тоді С-ПЛД (4) буде збігатися з С-ПЛД (2).

**Доведення.** Враховуючи умови теореми 3, ланцюговий дріб (4) запишемо у вигляді

$$Q_n(x) = a_0 + \frac{(x - x_0) \int_0^1 a_1(z_1) dz_1}{1} + \frac{(x - x_1) \int_0^1 a_2(z_2) dz_2}{1} + \dots + \frac{(x - x_{n-1}) \int_0^1 a_n(z_n) dz_n}{1}. \quad (12)$$

З інтерполяційної умови (5) одержимо

$$a_0 = f(x_0), \quad \tilde{a}_1 = \int_0^1 a_1(z_1) dz_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0},$$

$$\tilde{a}_2 = \int_0^1 a_2(z_2) dz_2 = \frac{1}{x_2 - x_1} \left( -1 + \frac{\tilde{a}_1(x_2 - x_0)}{f(x_2) - f(x_0)} \right).$$

За індукцією покажемо, що для  $m = \overline{3, n}$  має місце формула

$$\tilde{a}_m = \int_0^1 a_m(z_m) dz_m = \frac{1}{x_m - x_{m-1}} \left( -1 + \frac{\tilde{a}_{m-1}(x_m - x_{m-2})}{-1} + \dots + \frac{\tilde{a}_2(x_m - x_1)}{-1} + \frac{\tilde{a}_1(x_m - x_0)}{f(x_m) - f(x_0)} \right). \quad (13)$$

Для  $m = 1, 2$  формула (13) є вірною. Зробимо припущення, що вона виконується для  $m = \overline{1, k-1}$ . Тоді для  $m = k$  ланцюговий дріб (12) може бути записаний у вигляді

$$f(x_k) = a_0 + \frac{(x_k - x_0)\tilde{a}_1}{1} + \frac{(x_k - x_1)\tilde{a}_2}{1} + \dots + \frac{(x_k - x_{k-2})\tilde{a}_{k-1}}{1} + \frac{(x_k - x_{k-1})\tilde{a}_k}{1}. \quad (14)$$

Обертаючи ланцюговий дріб (14), отримаємо

$$\tilde{a}_k = \int_0^1 a_k(z_k) dz_k = \frac{1}{x_k - x_{k-1}} \left( -1 + \frac{\tilde{a}_{k-1}(x_k - x_{k-2})}{-1} + \dots + \frac{\tilde{a}_2(x_k - x_1)}{-1} + \frac{\tilde{a}_1(x_k - x_0)}{f(x_k) - f(x_0)} \right). \quad (15)$$

За своєю формою права частина формули (15) збігається з точністю до позначень із правою частиною формули (3), і, крім того, початкові умови є однаковими. Отже, формула (13) збігається з формулою (3).

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Макаров В.Л., Хлобыстов В.В. Основы теории полиномиального операторного интерполирования. Киев: Институт математики НАН Украины, 1999. 278 с.
2. Макаров В.Л., Хлобыстов В.В., Янович Л.А. Интерполирование операторов. Киев: Наук. думка, 2000. 406 с.
3. Джоунс У., Трон В. Непрерывные дроби. Аналитическая теория и приложения. Москва: Мир, 1985. 414 с.
4. Скоробогатко В.Я. Теория ветвящихся цепных дробей и ее применение в вычислительной математике. Москва: Наука, 1983. 312 с.
5. Сявавко М.С. Интегральні ланцюгові дроби. Київ: Наук. думка, 1994. 205 с.
6. Михальчук Б.Р. Интерполяція нелінійних функціоналів за допомогою інтегральних ланцюгових дробів. *Укр. мат. журн.* 1999. **51**, № 3. С. 364–375.
7. Макаров В.Л., Хлобыстов В.В., Михальчук Б.Р. Интерполяційні інтегральні ланцюгові дроби. *Укр. мат. журн.* 2003. **55**, № 4. С. 479–488.
8. Макаров В.Л., Демків І.І. Новий клас інтерполяційних інтегральних ланцюгових дробів. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2008. № 11. С. 17–23.
9. Макаров В.Л., Хлобыстов В.В., Демків І.І. Интерполяційні інтегральні операторні дроби в банаховому просторі. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2008. № 3. С. 17–23.
10. Макаров В.Л., Демків І.І. Интерполяційний інтегральний ланцюговий дріб типу Тіле. *Мат. методи та фіз.-мех. поля.* 2014. **57**, № 4. С. 44–50.
11. Макаров В.Л., Демків І.І. Інтерполяційний ланцюговий дріб типу Тіле. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2016. № 1. С. 12–18. doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2016.01.012>
12. Макаров В.Л., Демків І.І. Абстрактний інтерполяційний ланцюговий дріб типу Тіле. *Мат. методи та фіз.-мех. поля.* 2016. **59**, № 2. С. 50–57.
13. Пагіря М.М. Наближення функцій ланцюговими дробами. Ужгород: Гражда, 2016. 412 с.
14. Авербух В.И., Смолянов О.Г. Теория дифференцирования в линейных топологических пространствах. *Успехи мат. наук.* 1967. **22**, № 6. С. 201–260.
15. Макаров В.Л., Хлобыстов В.В., Кашпур Е.Ф., Михальчук Б.Р. Интегральные полиномы типа Ньютона с континуальными узлами. *Укр. мат. журн.* 2003. **55**, № 6. С. 779–789.

Надійшло до редакції 16.11.2017

#### REFERENCES

1. Makarov, V. L. & Khlobistov, V. V. (1999). Fundamentals of the theory of polynomial operator interpolation. Kiev: Institute of Mathematics of the NAS of Ukraine (in Russian).
2. Makarov, V. L., Khlobistov, V. V. & Yanovich, L. A. (2000). Interpolation of operators. Kiev: Naukova dumka (in Russian).
3. Jones, W. & Tron, W. (1985). Continued fractions. Analytic theory and applications. Moscow: Mir (in Russian).
4. Skorobogat'ko, V. Ya. (1983). Theory of Branching Continued Fractions and Its Application in Computational Mathematics. Moscow: Nauka (in Russian).
5. Syavavko, M. S. (1994). Integral continued fractions. Kiev: Naukova dumka (in Ukrainian).
6. Mykhal'chuk, B. R. (1999). Interpolation of nonlinear functionals by integral continued fractions. *Ukr. Mat. Zhurn.*, 51, No. 3, pp. 364-375 (in Ukrainian).
7. Makarov, V. L., Khlobistov, V. V. & Mykhal'chuk, B. R. (2003). Interpolation integral continued fractions. *Ukr. Mat. Zhurn.*, 55, No. 4, pp. 479-488 (in Ukrainian).
8. Makarov, V. L. & Demkiv, I. I. (2008). A new class of interpolation integral continued fractions. *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.*, No. 11, pp. 17-23 (in Ukrainian).

9. Makarov, V. L., Khlobistov, V. V. & Demkiv, I. I. (2008). Interpolation integral operator fractions in a Banach space. *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.*, No. 3, pp. 17-23 (in Ukrainian).
10. Makarov, V. L. & Demkiv, I. I. (2014). Interpolating integral continued fraction of Thiele type. *Mat. Metody ta Fiz.-Mekh. Polya*, 57, No. 4, pp. 44-50 (in Ukrainian).
11. Makarov, V. L. & Demkiv, I. I. (2016). An integral interpolation chain fraction of Thiele type. *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.*, No. 1, pp. 12-18 (in Ukrainian). doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2016.01.012>
12. Makarov, V. L. & Demkiv, I. I. (2016). Abstract interpolation Thiele-type fraction. *Mat. Metody ta Fiz.-Mekh. Polya*, 59, No. 2, pp. 50-57 (in Ukrainian).
13. Pahiryа, M. M. (2016). Approximation of functions by continued fractions. *Uzhhorod: Grazda* (in Ukrainian).
14. Averbukh, V. I. & Smolyanov, O. G. (1967). The theory of differentiation in linear topological spaces. *Uspehi Mat. Nauk*, 22, No. 6, pp. 201-260 (in Russian).
15. Makarov, V. L., Khlobystov, V. V., Kashpur, E. F. & Mikhal'chuk B. R. (2003). Integral Newton-Type Polynomials with Continual Nodes. *Ukr. Mat. Zhurn.*, 55, No. 6, pp. 779-789 (in Ukrainian).

Received 16.11.2017

*В.Л. Макаров*<sup>1</sup>, *М.М. Пагіря*<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Інститут математики НАН України, Київ

<sup>2</sup> Мукачевський державний університет, Мукачево

E-mail: makarovimath@gmail.com, pahirya@gmail.com

#### ИНТЕРПОЛЯЦИЯ ФУНКЦИОНАЛОВ ИНТЕГРАЛЬНЫМИ ЦЕПНЫМИ С-ДРОБЯМИ

Исследована задача интерполяции функционала интегральной цепной С-дробью, когда известны её значения на континуальном множестве узлов. Найдены необходимые и достаточные условия её разрешимости. В частном случае такая интегральная цепная дробь содержит в себе интерполяционную цепную С-дробь, которая используется для приближения функций одной переменной.

**Ключевые слова:** континуальные узлы, интегральные цепные С-дроби, интерполяция функционалов.

*V.L. Makarov*<sup>1</sup>, *M.M. Pahirya*<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Institute of Mathematics of the NAS of Ukraine, Kiev

<sup>2</sup> Mukachevo State University, Mukachevo

E-mail: makarovimath@gmail.com, pahirya@gmail.com

#### INTERPOLATION OF FUNCTIONALS BY INTEGRAL CONTINUED C-FRACTIONS

The problem of interpolation of a functional by an integral continued C-fraction if its value is known on the set of continual nodes is studied. The necessary and sufficient conditions for its solvability are found. In the partial case, such an integral continued fraction contains an interpolation continued C-fraction, which is used to approximate the functions of one variable.

**Keywords:** continual nodes, integral continued C-fraction, interpolation of a functional.

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.03.022>

УДК 004.8

**А.Ф. Кургаев**

Институт кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, Киев

E-mail: [afkurgaev@ukr.net](mailto:afkurgaev@ukr.net)

## Новое определение языка веб-онтологий OWL2

*Представлено академиком НАН Украины А.В. Палагиным*

*Даны в метаязыке нормальных форм знаний (НФЗ) описания манчестерского синтаксиса и синтаксиса функционального стиля языка веб-онтологий OWL 2 — центрального языка семантического стека Тима Бернерс-Ли. Наличие таких описаний гарантирует реализуемость языка OWL 2 с реализацией интерпретатора метаязыка НФЗ. Показано, что выразительные возможности метаязыка НФЗ для формального описания OWL 2 вполне сопоставимы с выразительными возможностями метаязыка Extended Backus-Naur Form.*

**Ключевые слова:** метаязык нормальных форм знаний, формальное описание, язык веб-онтологий OWL, Semantic Web, манчестерский синтаксис, синтаксис функционального стиля.

Поиск и использование нужной информации становятся все более трудоемкими и неэффективными. Уже осознана неизбежность перехода от хранения и обработки данных к накоплению и обработке знаний для борьбы с информационным насыщением общества.

Одно из направлений исследований и разработок, в котором для решения указанной проблемы сосредотачиваются значительные научно-технические ресурсы, — переход от классического интернета к семантическому, сохраняя основные принципы Web [1]:

– *децентрализация*, как отсутствие единого центра управления и распределенность ресурсов сети, создаваемых самими пользователями;

– *терпимость*, как универсальность доступа, независимо от аппаратной или программной платформы, сетевой инфраструктуры, языка, культуры, географического положения, физического или умственного нарушения.

Semantic Web — это веб-сайт, включающий документы, содержащие семантическую информацию в форме, доступной как людям, так и непосредственно компьютерам, для поиска, чтения, восприятия и использования информации при решении задач с помощью автоматизированных агентов и Web-сервисов [2].

Semantic Web создается на основе ряда стандартов, развиваемых и рекомендуемых консорциумом W3C [1–3]. В настоящее время на Semantic Web работают многие научные подразделения мира, разрабатывая и совершенствуя новые протоколы, технологии, среды программирования, языки, пользовательские интерфейсы, методы поиска знаний.

© А.Ф. Кургаев, 2018

Целью статьи является экспериментальное исследование выразительных возможностей метаязыка нормальных форм знаний (НФЗ) [4–6] на примере описания языка онтологий OWL 2 (Web Ontology Language) – центрального языка семантического стека Semantic Web (рис. 1).

**Характеристика языка OWL.** Язык OWL в настоящее время является наиболее развитым языком онтологий базовой модели стека стандартов Semantic Web для описания контента, понимаемого компьютерами [3, 7, 8]. OWL – это логический язык представления онтологии в виде документов, которые могут храниться и передаваться в глобальной сети подобно любым другим данным или информации.

На рис. 2 дана структура языка OWL 2 с его основными компонентами. Эллипс в центре объединяет абстрактную структуру OWL 2 с его RDF (Resource Description Framework) графом [7, п.2.1], которые могут быть воплощены в разные языковые формы [7, п.2.2] для тиражирования и обмена онтологиями. Синтаксис Manchester [9] – это синтаксис языка OWL, упрощенного для восприятия пользователями. Синтаксис Functional-Style [10] предназначен для целей спецификации и создания основы для реализации OWL 2-инструментов. Синтаксис OWL XML (eXtensible Markup Language) – это синтаксис OWL функционального стиля, определенный XML-схемой [11]. Синтаксис RDF / XML для OWL – это просто RDF / XML, с конкретным переводом для конструкций OWL [12]; он обязательно должен поддерживаться всеми инструментами OWL 2 для хранения и обмена онтологиями, в основном, в форме документов RDF.

Для экспериментального исследования выбраны два нормативных синтаксиса OWL 2 – манчестерский и синтаксис функционального стиля с использованием официальных редакций нормативных документов [9, 10].

В приведенных ниже формальных описаниях языка OWL 2 использованы следующие метасимволы метаязыка НФЗ [4-6]:

"=" – разделитель, отделяет имя понятия (нетерминала) от его определения;

";" – конец определения понятия;

" " (пробел) – отношение конкатенации;

"/" – отношение альтернативного выбора;

"(", ")" – итерационные скобки обрамляют повторяемую (нуль или больше раз) структуру понятий;

"^" – отношение отрицания примыкающего понятия;

" ' " – текстовая кавычка;

true – тождественно истинное понятие с пустым объемом;

знаки /\* и \*/ обрамляют комментарий.

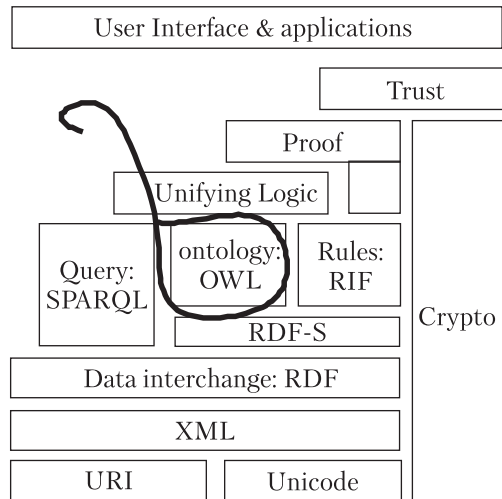


Рис. 1. Место OWL в семантическом стеке Тима Бернерс-Ли [3]

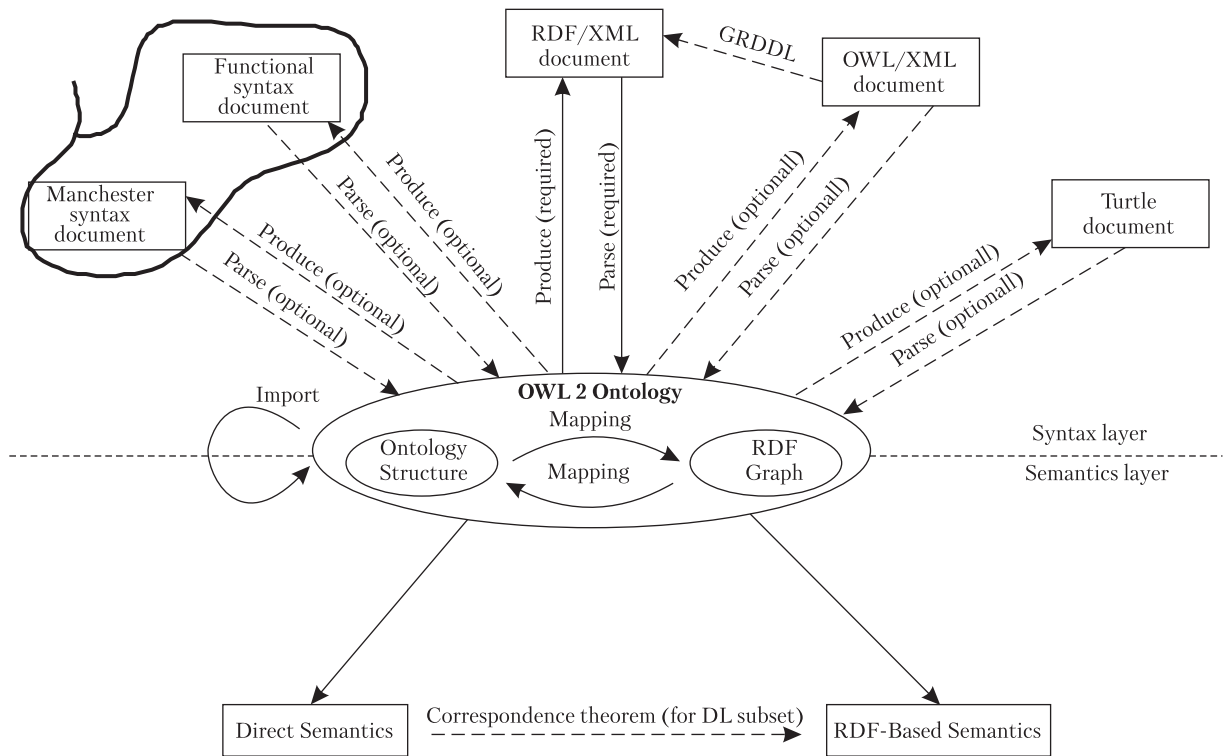


Рис. 2. Структура языка OWL 2 [7]

**Описание в метаязыке НФЗ манчестерского синтаксиса.** В табл. 1 дано в метаязыке НФЗ текстовое описание манчестерского синтаксиса языка OWL 2, а на рис. 3 — описание структуры верхнего уровня этого синтаксиса в форме графа.

**Описание в метаязыке НФЗ синтаксиса функционального стиля языка OWL 2.** В табл. 2 дано текстовое описание в метаязыке НФЗ синтаксиса функционального стиля языка OWL 2, а на рис. 4 — описание структуры верхнего уровня этого синтаксиса в форме графа.

**Сопоставление предлагаемых с нормативными описаниями OWL 2.** Нормативное описание манчестерского синтаксиса языка онтологий OWL 2 метаязыком Extended Backus-Naur Form (EBNF) [9] включает 87, а аналогичное описание метаязыком НФЗ (см. табл. 1) — 100 продукций.

Дополнительные правила НФЗ-описания манчестерского синтаксиса использованы для моделирования структурных скобок: (29) — `floatingBody`, (30) — `fractional`, (32) — `floatingPost`, (82) — `classFrame_` и (89) — `fact_`, а необязательности: (35) — `sgn`, (44) — `ontologyIRI_`, (46) — `versionIRI_`, (63) — `primary_`, (64) — `dataPrimary_`, (67) — `datatypeFrame_`, (70) — `anns_` и (89) — `not`.

Нормативное описание метаязыком EBNF [10] синтаксиса функционального стиля языка OWL 2 включает 120 продукций, а аналогичное НФЗ-описание (см. табл. 2) — 124 продукции. Дополнительные четыре правила НФЗ-описания нетерминалов функционального синтаксиса использованы для моделирования необязательности: (12) — `ontologyIRI_`, (14) — `versionIRI_`, (67) — `ClassExpression_` и (74) — `DataRange_`.



Таблица 1. Описание в метаязыке НФЗ манчестерского стиля языка OWL 2

Интернационализованные идентификаторы ресурса (IRIs), целые числа, литералы и сущности		
1	fullIRI	= /* IRI, как определено в [13], заключенное в пару символов < (U + 3C) и > (U + 3E) */
2	prefName	= /* конечная последовательность символов, соответствующая продукции PNAME_NS из [14] и не соответствующая любому из терминалов ключевого слова синтаксиса */
3	abbrIRI	= /* конечная последовательность символов, соответствующая продукции PNAME_LN из [14] */
4	simIRI	= /* конечная последовательность символов, соответствующая продукции PN_LOCAL из [14] и не соответствующая любому из терминалов ключевого слова синтаксиса */
5	IRI	= fullIRI / abbrIRI / simIRI;
6	nonNegInt	= zero / posInt;
7	posInt	= nonZero ( digit );
8	digits	= digit ( digit );
9	digit	= zero / nonZero;
10	nonZero	= '1' / '2' / '3' / '4' / '5' / '6' / '7' / '8' / '9';
11	zero	= '0';
12	clIRI	= IRI;
13	Dtype	= dtypeIRI / 'integer' / 'decimal' / 'float' / 'string';
14	dtypeIRI	= IRI;
15	objPrIRI	= IRI;
16	dPrIRI	= IRI;
17	annPrIRI	= IRI;
18	ind	= indIRI / nodeID;
19	indIRI	= IRI;
20	nodeID	= /* конечная последовательность символов, соответствующая продукции BLANK_NODE_LABEL из [14]
21	lit	= typLit / strLitNoLang / strLitWithLang / intLit / decLit / flPointLit;
22	typLit	= lexVal ^^ Dtype;
23	strLitNoLang	= quotStr;
24	strLitWithLang	= quotStr langTag;
25	langTag	= /* @ (U + 40) следовали за непустой последовательностью символов, соответствующих продукции langtag из [15] */
26	lexVal	= quotStr;
27	quotStr	= /* заключенная в пару символов (U + 22) конечная последовательность символов, в которой " (U + 22) и \ (U + 5C) встречаются только в парах вида \ " (U + 5C, U + 22) и \ \ (U + 5C, U + 5C) */
28	flPointLit	= sgn flBody exp flPost;
29	flBody	= digits fract / '.' digits ;
30	fract	= '.' digits / true;
31	exp	= 'e' sgn digits / 'E' sgn digits / true;
32	flPost	= 'f' / 'F';
33	decLit	= sgn digits '.' digits;
34	intLit	= sgn digits;
35	sgn	= '+' / '-' / true;

36	entity	= 'Datatype' (' Dtype ') / 'Class' (' clIRI ') / 'ObjectProperty' (' objPrIRI ') / 'DataProperty' (' dPrIRI ') / 'AnnotationProperty' (' annPrIRI ') / 'NamedIndividual' (' indIRI ');
Онтологии и аннотации		
37	anns	= 'Annotations:' annAnnList;
38	ann	= annPrIRI annTarg;
39	annTarg	= nodeID / IRI / lit;
40	ontoDoc	= ( prefDecl ) ontology;
41	prefDecl	= 'Prefix:' prefName fullIRI ;
42	ontology	= 'Ontology:' ontIRI_ (import) ( anns ) ( frame );
43	ontIRI	= IRI;
44	ontIRI_	= ontIRI versIRI_ / true;
45	versIRI	= IRI;
46	versIRI_	= versIRI / true;
47	import	= 'Import:' IRI ;
48	frame	= dtypeFr / clFr / objPrFr / dPrFr / annPrFr / indFr / misc;
Выражения свойств и типов данных		
49	objPrExpr	= objPrIRI / invObjPr;
50	invObjPr	= 'inverse' objPrIRI;
51	dPrExpr	= dPrIRI;
52	dRange	= dConj 'or' dConj ( 'or' dConj ) / dConj;
53	dConj	= dPrim 'and' dPrim ( 'and' dPrim ) / dPrim;
54	dPrim	= not dAtom;
55	dAtom	= Dtype / '{ litList }' / dtypeRestr / '(' dRange ');
56	dtypeRestr	= Dtype '[' facet restrVal ( ',' facet restrVal ) '];
57	facet	= 'length' / 'minLength' / 'maxLength' / 'pattern' / 'langRange' / '<=' / '<' / '>=' / '>';
58	restrVal	= lit;
Описания		
59	descr	= conj 'or' conj ( 'or' conj ) / conj;
60	conj	= clIRI 'that' not restr ( 'and' not restr ) / prim 'and' prim ( 'and' prim ) / prim;
61	prim	= not restr / not atom;
62	restr	= objPrExpr 'some' prim / objPrExpr 'only' prim / objPrExpr 'value' ind / objPrExpr 'Self' / objPrExpr 'min' nonNegInt prim_ / objPrExpr 'max' nonNegInt prim_ / objPrExpr 'exactly' nonNegInt prim_ / dPrExpr 'some' dPrim / dPrExpr 'only' dPrim / dPrExpr 'value' lit / dPrExpr 'min' nonNegInt dPrim_ / dPrExpr 'max' nonNegInt dPrim_ / dPrExpr 'exactly' nonNegInt dPrim_;
63	prim_	= prim / true;
64	dPrim_	= dPrim / true;
65	atom	= clIRI / '{ indList }' / '(' descr ');
Фреймы и разное		
66	dtypeFr	= 'Datatype:' Dtype ( 'Annotations:' annAnnList ) dtypeFr_ ( 'Annotations:' annAnnList );
67	dtypeFr_	= 'EquivalentTo:' anns dRange / true;
68	litList	= lit ( ',' lit );
69	annAnnList	= anns_ ann ( ',' anns_ ann );
70	anns_	= anns / true;

71	descrAnnList	=	anns_descr ( ',' anns_descr );
72	objPrCharAnnList	=	anns_objPrChar ( ',' anns_objPrChar );
73	objPrExprAnnList	=	anns_objPrExpr ( ',' anns_objPrExpr );
74	dRangAnnList	=	anns_dRange ( ',' anns_dRange );
75	IRIAnnList	=	anns_IRI ( ',' anns_IRI );
76	dPrExprAnnList	=	anns_dPrExpr ( ',' anns_dPrExpr );
77	annPrIRIAnnList	=	anns_annPrIRI ( ',' anns_annPrIRI );
78	factAnnList	=	anns_fact ( ',' anns_fact );
79	indAnnList	=	anns_ind ( ',' anns_ind );
80	clFr	=	'Class:' clIRI ( 'Annotations:' annAnnList / 'SubClassOf:' descrAnnList / 'EquivalentTo:' descrAnnList / 'DisjointWith:' descrAnnList / 'DisjointUnionOf:' anns_descr2List ) / 'HasKey:' anns clFr_ ( clFr_ );
81	clFr_	=	objPrExpr / dPrExpr;
82	objPrFr	=	'ObjectProperty:' objPrIRI ( 'Annotations:' annAnnList / 'Domain:' descrAnnList / 'Range:' descrAnnList / 'Characteristics:' objPrCharAnnList / 'SubPropertyOf:' objPrExprAnnList / 'EquivalentTo:' objPrExprAnnList / 'DisjointWith:' objPrExprAnnList / 'InverseOf:' objPrExprAnnList / 'SubPropertyChain:' anns_objPrExpr 'o' objPrExpr ( 'o' objPrExpr ) );
83	objPrChar	=	'Functional' / 'InverseFunctional' / 'Reflexive' / 'Irreflexive' / 'Symmetric' / 'Asymmetric' / 'Transitive';
84	dPrFr	=	'DataProperty:' dPrIRI ( 'Annotations:' annAnnList / 'Domain:' descrAnnList / 'Range:' dRangeAnnList / 'Characteristics:' anns 'Functional' / 'SubPropertyOf:' dPrExprAnnList / 'EquivalentTo:' dPrExprAnnList / 'DisjointWith:' dPrExprAnnList );
85	annPrFr	=	'AnnotationProperty:' annPrIRI ( 'Annotations:' annAnnList ) / 'Domain:' IRIAnnList / 'Range:' IRIAnnList / 'SubPrOf:' annPrIRIAnnList;
86	indFr	=	'Individual:' ind ( 'Annotations:' annAnnList / 'Types:' descrAnnList / 'Facts:' factAnnList / 'SameAs:' indAnnList / 'DifferentFrom:' indAnnList );
87	fact	=	not fact_;
88	fact_	=	objPrFact / dPrFact;
89	not	=	'not' / true;
90	objPrFact	=	objPrIRI ind;
91	dPrFact	=	dPrIRI lit;
92	misc	=	'EquivalentClasses:' anns_descr2List / 'DisjointClasses:' anns_descr2List / 'EquivalentProperties:' anns_objPr2List / 'DisjointProperties:' anns_objPr2List / 'EquivalentProperties:' anns_dPr2List / 'DisjointProperties:' anns_dPr2List / 'SameIndividual:' anns_ind2List / 'DifferentIndividuals:' anns_ind2List;
93	descr2List	=	descr ',' descrList;
94	descrList	=	descr ( ',' descr );
95	objPr2List	=	objPrIRI ',' objPrList;
96	objPrList	=	objPrIRI ( ',' objPrIRI );
97	dPr2List	=	dPrIRI ',' dPrList;
98	dPrList	=	dPrIRI ( ',' dPrIRI );
99	ind2List	=	ind ',' indList;
100	indList	=	ind ( ',' ind );





Таблица 2. Описание в метаязыке НФЗ синтаксиса функционального стиля языка OWL2

Целые числа, символы, строки, теги языка и идентификаторы узлов		
1	nonNegInt	= /* непустая конечная последовательность цифр между 0 и 9 */
2	quotStr	= /* заключенная в пару символов (U+22) конечная последовательность символов, в которой символы "(U+22) и \"(U+5C) встречаются лишь в парах \"(U+5C, U+22) и \"\"(U+5C, U+5C) */
3	langTag	= /* @ (U+40) следовали за непустой последовательностью символов, соответствующих продукции langtag из [15] */
4	nodeID	= /* конечная последовательность символов, соответствующая продукции BLANK_NODE_LABEL из [14] */
Интернационализованные идентификаторы ресурсов (IRI)		
5	fullIRI	= /* IRI, как определено в [13], заключенное в пару символов <(U+3C) >(U+3E) */
6	prefName	= /* конечная последовательность символов, соответствующая продукции PNAME_NS из [14] */
7	abbrIRI	= /* конечная последовательность символов, соответствующая продукции PNAME_LN из [14] */
8	IRI	= fullIRI / abbrIRI;
Онтологии		
9	ontoDoc	= ( prefDecl ) Ontology;
10	prefDecl	= 'Prefix' '( prefName '=' fullIRI )';
11	Ontology	= 'Ontology' '( ontIRI_dirImpDoc ontAnns axioms )';
12	ontIRI_	= ontIRI versIRI_ / true;
13	ontIRI	= IRI;
14	versIRI_	= versIRI / true;
15	versIRI	= IRI;
16	dirImpDoc	= ( 'Import' '( IRI ) );
17	ontAnns	= ( Ann );
18	axioms	= ( Axiom );
19	AnnVal	= AnonymInd / IRI / Lit;
20	axAnns	= ( Ann );
Аннотации		
21	Ann	= 'Annotation' '( annAnns AnnPr AnnVal )';
22	annAnns	= ( Ann );
23	AnnAx	= AnnAss / SubAnnPrOf / AnnPrDom / AnnPrRange;
24	AnnAss	= 'AnnotationAssertion' '( axAnns AnnPr AnnSubj AnnVal )';
25	AnnSubj	= IRI / AnonymInd;
26	SubAnnPrOf	= 'SubAnnPrOf' '( axAnns subAnnPr superAnnPr )';
27	subAnnPr	= AnnPr;
28	superAnnPr	= AnnPr;
29	AnnPrDom	= 'AnnotationPropertyDomain' '( axAnns AnnPr IRI )';
30	AnnPrRange	= 'AnnotationPropertyRange' '( axAnns AnnPr IRI )';
Сущности, литералы и анонимные индивидуумы		
31	Class	= IRI;
32	Dtype	= IRI;
33	ObjPr	= IRI;
34	DPr	= IRI;

35	AnnPr	=	IRI;
36	Ind	=	NamInd / AnonymInd;
37	NamInd	=	IRI;
38	AnonymInd	=	nodeID;
39	Lit	=	typLit / strLitNoLang / strLitWithLang;
40	typLit	=	lexForm '^' Dtype;
41	lexForm	=	quotStr;
42	strLitNoLang	=	quotStr;
43	strLitWithLang	=	quotStr langTag;
44	Decl	=	'Declaration' (' axAnns Entity ');
45	Entity	=	'Class' (' Class ') / 'Datatype' (' Dtype ') / 'ObjectProperty' (' ObjPr ') / 'DataProperty' (' DPr ') / 'AnnotationProperty' (' AnnPr ') / 'NamedIndividual' (' NamInd ');
Выражения свойств			
46	ObjPrExpr	=	ObjPr / InvObjPr;
47	InvObjPr	=	'ObjectInverseOf' (' ObjPr ');
48	DPrExpr	=	DPr;
Диапазоны данных			
49	DRange	=	Dtype / DInterOf / DUnOf / DComplOf / DOneOf / DtypeRestr;
50	DInterOf	=	'DataIntersectionOf' (' DRange DRange ( DRange ) ');
51	DUnOf	=	'DataUnionOf' (' DRange DRange ( DRange ) ');
52	DComplOf	=	'DataComplementOf' (' DRange ');
53	DOneOf	=	'DataOneOf' (' Lit ( Lit ) ');
54	DtypeRestr	=	'DatatypeRestriction' (' Dtype constrFacet restrVal (constrFacet restrVal ) ');
55	constrFacet	=	IRI;
56	restrVal	=	Lit;
Выражения класса			
57	ClExpr	=	Class / ObjInterOf / ObjUnOf / ObjComplOf / ObjOneOf / ObjSomeValFrom / ObjAllValFrom / ObjHasVal / ObjHasSelf / ObjMinCard / ObjMaxCard / ObjExactCard / DSomeValFrom / DallValFrom / DhasVal / DMinCard / DMaxCard / DExactCard;
58	ObjInterOf	=	'ObjectIntersectionOf' (' ClExpr ClExpr ( ClExpr ) ');
59	ObjUnOf	=	'ObjectUnionOf' (' ClExpr ClExpr ( ClExpr ) ');
60	ObjComplOf	=	'ObjectComplementOf' (' ClExpr ');
61	ObjOneOf	=	'ObjectOneOf' (' Ind ( Ind ) ');
62	ObjSomeValFrom	=	'ObjectSomeValuesFrom' (' ObjPrExpr ClExpr ');
63	ObjAllValFrom	=	'ObjectAllValuesFrom' (' ObjPrExpr ClExpr ');
64	ObjHasVal	=	'ObjectHasValue' (' ObjPrExpr Ind ');
65	ObjHasSelf	=	'ObjectHasSelf' (' ObjPrExpr ');
66	ObjMinCard	=	'ObjectMinCardinality' (' nonNegInt ObjPrExpr ClExpr_ ');
67	ClExpr_	=	ClassExpression / true;
68	ObjMaxCard	=	'ObjectMaxCardinality' (' nonNegInt ObjPrExpr ClExpr_ ');
69	ObjExactCard	=	'ObjectExactCardinality' (' nonNegInt ObjPrExpr ClExpr_ ');
70	DSomeValFrom	=	'DataSomeValuesFrom' (' DPrExpr ( DPrExpr ) DRange ');
71	DAllValFrom	=	'DataAllValuesFrom' (' DPrExpr ( DPrExpr ) DRange ');

72	DHasVal	=	'DataHasValue' (' DPrExpr Lit ');
73	DMinCard	=	'DataMinCardinality' (' nonNegInt DPrExpr DRange_ ');
74	DRange_	=	DRange / true;
75	DMaxCard	=	'DataMaxCardinality' (' nonNegInt DPrExpr DRange_ ');
76	DExactCard	=	'DataExactCardinality' (' nonNegInt DPrExpr DRange_ ');
АКСИОМЫ			
77	Axiom	=	Decl / ClAx / ObjPrAx / DPrAx / DtypeDef / HasKey / Ass / AnnAx;
78	ClAx	=	SubClOf / EquCl / DisjCl / DisjUnion;
79	SubClOf	=	'SubClassOf' (' axAnns subClExpr supClExpr ');
80	subClExpr	=	ClExpr;
81	supClExpr	=	ClExpr;
82	EquCl	=	'EquivalentClasses' (' axAnns ClExpr ClExpr ( ClExpr ) ');
83	DisjCl	=	'DisjointClasses' (' axAnns ClExpr ClExpr ( ClExpr ) ');
84	DisjUnion	=	'DisjointUnion' (' axAnns Class disjClExpr ');
85	disjClExpr	=	ClExpr ClExpr ( ClExpr );
86	ObjPrAx	=	SubObjPrOf / EquObjPr / DisjObjPr / InvObjPr / ObjPrDom / ObjPrRange / FunctObjPr / InvFunctObjPr / ReflObjPr / IrreflObjPr / SymmObjPr / AsymmObjPr / TransObjPr;
87	SubObjPrOf	=	'SubObjectPropertyOf' (' axAnns subObjPrExpr supObjPrExpr ');
88	subObjPrExpr	=	ObjPrExpr / prExprChain;
89	prExprChain	=	'ObjectPropertyChain' (' ObjPrExpr ObjPrExpr ( ObjPrExpr ) ');
90	supObjPrExpr	=	ObjPrExpr;
91	EquObjPr	=	'EquivalentObjectProperties' (' axAnns ObjPrExpr ObjPrExpr ( ObjPrExpr ) ');
92	DisjObjPr	=	'DisjointObjectProperties' (' axAnns ObjPrExpr ObjPrExpr ( ObjPrExpr ) ');
93	ObjPrDom	=	'ObjectPropertyDomain' (' axAnns ObjPrExpr ClExpr ');
94	ObjPrRange	=	'ObjectPropertyRange' (' axAnns ObjPrExpr ClExpr ');
95	InvObjPr	=	'InverseObjectProperties' (' axAnns ObjPrExpr ObjPrExpr ');
96	FunctObjPr	=	'FunctionalObjectProperty' (' axAnns ObjPrExpr ');
97	InvFunctObjPr	=	'InverseFunctionalObjectProperty' (' axAnns ObjPrExpr ');
98	ReflObjPr	=	'ReflexiveObjectProperty' (' axAnns ObjPrExpr ');
99	IrreflObjPr	=	'IrreflexiveObjectProperty' (' axAnns ObjPrExpr ');
100	SymmObjPr	=	'SymmetricObjectProperty' (' axAnns ObjPrExpr ');
101	AsymmObjPr	=	'AsymmetricObjectProperty' (' axAnns ObjPrExpr ');
102	TransObjPr	=	'TransitiveObjectProperty' (' axAnns ObjPrExpr ');
103	DPrAx	=	SubDPrOf / EquDPr / DisjDPr / DPrDom / DPrRange / FunctDPr;
104	SubDPrOf	=	'SubDataPropertyOf' (' axAnns subDPrExpr supDPrExpr ');
105	subDPrExpr	=	DPrExpr;
106	supDPrExpr	=	DPrExpr;
107	EquDPr	=	'EquivalentDataProperties' (' axAnns DPrExpr DPrExpr ( DPrExpr ) ');
108	DisjDPr	=	'DisjointDataProperties' (' axAnns DPrExpr DPrExpr ( DPrExpr ) ');
109	DPrDom	=	'DataPropertyDomain' (' axAnns DPrExpr ClExpr ');
110	DPrRange	=	'DataPropertyRange' (' axAnns DPrExpr DRange ');
111	FunctDPr	=	'FunctionalDataProperty' (' axAnns DPrExpr ');
112	DtypeDef	=	'DatatypeDefinition' (' axAnns Dtype DRange ');



113	HasKey	=	'HasKey' '(' axAnns CExpr '(' ( ObjPrExpr ) ') '(' ( DPrExpr ) ') ')';
114	Ass	=	SameInd / DiffInd / CAss / ObjPrAss / NegObjPrAss / DPrAss / NegDPrAss;
115	sourceInd	=	Ind;
116	targetInd	=	Ind;
117	targetVal	=	Lit;
118	SameInd	=	'SameIndividual' '(' axAnns Ind Ind ( Ind ) ')';
119	DiffInd	=	'DifferentIndividuals' '(' axAnns Ind Ind ( Ind ) ')';
120	CAss	=	'ClassAssertion' '(' axAnns CExpr Ind ')';
121	ObjPrAss	=	'ObjectPropertyAssertion' '(' axAnns ObjPrExpr sourceInd targetInd ')';
122	NegObjPrAss	=	'NegativeObjectPropertyAssertion' '(' axAnns ObjPrExpr sourceInd targetInd ')';
123	DPrAss	=	'DataPropertyAssertion' '(' axAnns DPrExpr sourceInd targetVal ')';
124	NegDPrAss	=	'NegativeDataPropertyAssertion' '(' axAnns DPrExpr sourceInd targetVal ')';

Главным результатом сопоставления пар рассмотренных описаний является следующее утверждение.

**Утверждение 1.** Выразительных возможностей метаязыка НФЗ достаточно для формального описания языка онтологий OWL 2.

Таким образом, в статье исследованы выразительные возможности метаязыка НФЗ по отношению к разным версиям синтаксиса языка онтологий OWL 2 — центрального языка семантического стека Тима Бернерс-Ли. Даны формальные текстовые и графические описания этих языков, чье наличие гарантирует реализуемость версий языка онтологий OWL 2 с реализацией интерпретатора метаязыка НФЗ. Показано, что выразительные возможности метаязыка НФЗ для формального описания языка онтологий OWL 2 близки выразительным возможностям метаязыка EBNF.

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Berners-Lee T. Web Architecture from 50,000 feet. URL: <https://www.w3.org/DesignIssues/Architecture.html>
2. Web Architecture: Describing and Exchanging Data. W3C Note 7 June 1999. URL: <https://www.w3.org/1999/04/WebData>
3. Berners-Lee T., Hall W., Hendler J.A., O'Hara K., Shadbolt N., Weitzner D.J. A Framework for Web Science. *Foundations and Trends in Web Science*. 2006. 1, № 1. P. 1–130. 2006. doi: <https://doi.org/10.1561/1800000001>
4. Кургаев А.Ф., Григорьев С.Н. Нормальные формы знаний. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2015. № 11. С. 36–43. doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2015.11.036>
5. Кургаев А.Ф., Григорьев С.Н. Метаязык нормальных форм знаний. *Кибернетика и системный анализ*. 2016. 52, № 6. С. 11–20. doi: <https://doi.org/10.1007/s10559-016-9885-3>
6. Кургаев А.Ф., Григорьев С.Н. Определение формальных языков в метаязыке нормальных форм знаний. *Пробл. програмування*. 2017. № 4. С. 37–50.
7. OWL 2 Web Ontology Language: Document Overview (2nd ed.). W3C Recommendation 11 December 2012. URL: <http://www.w3.org/TR/2012/REC-owl2-overview-20121211/>
8. OWL 2 Web Ontology Language: Primer (2nd ed.). W3C Recommendation 11 December 2012. URL: <http://www.w3.org/TR/owl-primer>
9. OWL 2 Web Ontology Language: Manchester Syntax (2nd ed.). W3C Working Group Note 11 December 2012. URL: <http://www.w3.org/TR/2012/NOTE-owl2-manchester-syntax-20121211/>

10. OWL 2 Web Ontology Language: Structural Specification and Functional-Style Syntax (2nd ed.). W3C Recommendation 11 December 2012. URL: <http://www.w3.org/TR/2012/REC-owl2-syntax-20121211/>
11. OWL 2 Web Ontology Language: XML Serialization (2nd ed.). W3C Recommendation 11 December 2012. URL: <http://www.w3.org/TR/2012/REC-owl2-xml-serialization-20121211/>
12. OWL 2 Web Ontology Language: Mapping to RDF Graphs (2nd ed.). W3C Recommendation 11 December 2012. URL: <http://www.w3.org/TR/2012/REC-owl2-mapping-to-rdf-20121211/>
13. Duerst M., Suignard M. RFC 3987: Internationalized Resource Identifiers (IRIs). IETF, January 2005. URL: <http://www.ietf.org/rfc/rfc3987.txt>
14. SPARQL 1.1: Query Language. W3C Recommendation 21 March 2013. URL: <http://www.w3.org/TR/2013/REC-sparql11-query-20130321/>
15. Tags for Identifying Languages. BCP: 47. URL: <http://www.rfc-editor.org/rfc/bcp/bcp47.txt>

Поступило в редакцию 06.11.2017

## REFERENCES

1. Berners-Lee, T. Web Architecture from 50,000 feet. Retrieved from <https://www.w3.org/DesignIssues/Architecture.html>.
2. Web Architecture: Describing and Exchanging Data. W3C Note 7 June 1999. Retrieved from <https://www.w3.org/1999/04/WebData>
3. Berners-Lee, T., Hall, W., Hendler, J. A., O'Hara, K., Shadbolt, N. & Weitzner, D. J. (2006). A Framework for Web Science. *Foundations and Trends in Web Science*. 1, No. 1, pp. 1-130. doi: <https://doi.org/10.1561/1800000001>
4. Kurgaev, A. & Grygoryev, S. (2015). The normal forms of knowledge. *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.*, No. 11, pp. 36-43 (in Russian). doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2015.11.036>
5. Kurgaev, A. & Grygoryev, S. (2016). Metalanguage of Normal Forms of Knowledge. *Cybernetics and Systems Analysis*, 52, No. 6, pp. 839-848. doi: <https://doi.org/10.1007/s10559-016-9885-3>
6. Kurgaev, A. & Grygoryev, S. (2017). The definition of formal languages in the meta language of normal forms of knowledge. *Programming problems*, No. 4, pp. 37-50 (in Russian).
7. OWL 2 Web Ontology Language: Document Overview (2nd ed.). W3C Recommendation 11 December 2012. Retrieved from <http://www.w3.org/TR/2012/REC-owl2-overview-20121211/>
8. OWL 2 Web Ontology Language: Primer (2nd ed.). W3C Recommendation 11 December 2012. Retrieved from <http://www.w3.org/TR/owl-primer>
9. OWL 2 Web Ontology Language: Manchester Syntax (2nd ed.). W3C Working Group Note 11 December 2012. Retrieved from <http://www.w3.org/TR/2012/NOTE-owl2-manchester-syntax-20121211/>
10. OWL 2 Web Ontology Language: Structural Specification and Functional-Style Syntax (2nd ed.). W3C Recommendation 11 December 2012. Retrieved from <http://www.w3.org/TR/2012/REC-owl2-syntax-20121211/>
11. OWL 2 Web Ontology Language: XML Serialization (2nd ed.). W3C Recommendation 11 December 2012. Retrieved from <http://www.w3.org/TR/2012/REC-owl2-xml-serialization-20121211/>
12. OWL 2 Web Ontology Language: Mapping to RDF Graphs (2nd ed.). W3C Recommendation 11 December 2012. Retrieved from <http://www.w3.org/TR/2012/REC-owl2-mapping-to-rdf-20121211/>
13. Duerst M., Suignard M. RFC 3987: Internationalized Resource Identifiers (IRIs). IETF, January 2005. Retrieved from <http://www.ietf.org/rfc/rfc3987.txt>
14. SPARQL 1.1: Query Language. W3C Recommendation 21 March 2013. Retrieved from <http://www.w3.org/TR/2013/REC-sparql11-query-20130321/>
15. Tags for Identifying Languages. BCP: 47. Retrieved from <http://www.rfc-editor.org/rfc/bcp/bcp47.txt>

Received 06.11.2017

*О.П. Кургаев*

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ  
E-mail: afkurgaev@ukr.net

#### НОВЕ ВИЗНАЧЕННЯ МОВИ ВЕБ-ОНТОЛОГІЙ OWL2

Дано у метамові нормальних форм знань (НФЗ) описи манчестерського синтаксису й синтаксису функціонального стилю мови веб-онтологій OWL 2 — центральної мови семантичного стека Тіма Бернерс-Лі. Наявність таких описів гарантує реалізуємість мови OWL 2 з реалізацією інтерпретатора метамови НФЗ. Показано, що виразні можливості метамови НФЗ для формального опису OWL 2 цілком порівняні з виразними можливостями метамови Extended Backus-Naur Form.

**Ключові слова:** *метамова нормальних форм знань, формальний опис, мова веб-онтологій OWL, Semantic Web, манчестерський синтаксис, синтаксис функціонального стилю.*

*A.F. Kurgaev*

V.M. Glushkov Institute of Cybernetics of the NAS of Ukraine, Kiev  
E-mail: afkurgaev@ukr.net

#### NEW DEFINITION OF THE WEB ONTOLOGY LANGUAGE OWL2

In the metalanguage of normal forms of knowledge (NFK), we give descriptions of the Manchester syntax and syntax of the functional style of the web ontology language OWL 2 — the central language of the semantic stack by Tim Berners-Lee. The availability of such descriptions guarantees that OWL 2 can be implemented as long as the interpreter of the NFK meta-language is implemented first. It is shown that the expressive capabilities of the NFK meta-language for the description of OWL 2 are quite comparable with the expressive capabilities of the meta-language of Extended Backus-Naur Form.

**Keywords:** *metalanguage of normal forms of knowledge, formal description, OWL web ontology language, semantic Web, Manchester syntax, functional style syntax.*

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.03.036>

УДК 539.375

**В.М. Назаренко, О.Л. Кіпніс**

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

E-mail: a.l.kipnis@gmail.com

## **Гранична рівновага кусково-однорідного пружного тіла з міжфазними зсувними тріщинами у кутовій точці межі поділу середовищ**

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

*Досліджено граничну рівновагу кусково-однорідного ізотропного пружного тіла з міжфазними зсувними тріщинами у кутовій точці межі поділу середовищ. Точний розв'язок відповідної задачі теорії пружності для клиноподібного тіла побудовано методом Вінера—Гонфа.*

**Ключові слова:** *межа поділу середовищ, кутова точка, міжфазні зсувні тріщини, гранична рівновага, метод Вінера—Гонфа.*

Як свідчать літературні джерела з механіки руйнування, в більшості праць, присвячених дослідженню плоских статичних задач теорії пружності для клиноподібних областей з тріщинами в вершині, а також інших задач про лінії розриву переміщення у кутових точках, тіло вважається однорідним [1–7]. У випадку кусково-однорідного тіла досліджувались лише задачі про лінії розриву переміщення в кінцях міжфазних тріщин та у кінці тріщини, що виходить на межу поділу середовищ [8, 9]. Задачі механіки руйнування, в яких досліджувався б напружено-деформований стан біля тріщин у кутових точках кусково-однорідних пружних тіл, не розглядалися.

Нижче проведено дослідження граничної рівноваги кусково-однорідного ізотропного пружного тіла з маломасштабними міжфазними зсувними тріщинами у кутовій точці межі поділу середовищ.

**Постановка задачі.** В умовах плоскої деформації в рамках статичної симетричної задачі розглянемо кусково-однорідне тіло з межею поділу середовищ у формі сторін кута, яке складене з ізотропних пружних частин з модулями Юнга  $E_1, E_2$  ( $E_1 > E_2$ ) і коефіцієнтами Пуассона  $\nu_1, \nu_2$  (рис. 1).

У відповідності до загальних положень про поведінку напружень біля кутових точок пружних тіл, кутова точка межі поділу середовищ  $O$  являє собою концентратор напружень зі степеневою особливістю. Головні члени розвинень напружень в асимптотичні ряди при  $r \rightarrow 0$  є розв'язком однорідної задачі теорії пружності (задача К) для кусково-однорідної

площини з межею поділу середовищ у формі сторін кута, який породжується єдиним на інтервалі  $]-1; 0[$  коренем  $\lambda_0$  її характеристичного рівняння.

При цьому мають місце формули вигляду

$$\tau_{r\theta}(r, 0) = Cg_1(\alpha, e_0, v_1, v_2)r^{\lambda_0} + o(r^{\lambda_0}),$$

$$\sigma_\theta(r, 0) = Cg_2(\alpha, e_0, v_1, v_2)r^{\lambda_0} + o(r^{\lambda_0}), \quad e_0 = \frac{E_1}{E_2} \quad (r \rightarrow 0),$$

де функції  $g_1, g_2$  визначаються з розв'язку задачі К, а стала  $C$  – з розв'язку кожної конкретної задачі теорії пружності, яка зображена на рис. 1. Сталу  $C$ , що залежить від зовнішнього навантаження, можна розглядати як коефіцієнт інтенсивності напружень у кутовій точці межі поділу середовищ.

Результати розрахунків показують, що  $\lambda_0 > -1/2$ ;  $g_1(\alpha) < 0$  при  $\alpha \neq 0, \pi/2, \pi$ ;  $g_1(0) = g_1(\pi/2) = g_1(\pi) = 0$ ;  $g_1 = 0$ , якщо  $E_1 = E_2, v_1 = v_2$ ;  $g_2(\alpha) < 0$  при  $\alpha \in ]0; \alpha_1[ \cup ]\pi/2; \alpha_2[$ ;  $g_2(\alpha) > 0$  при  $\alpha \in ]\alpha_1; \pi/2[ \cup ]\alpha_2; \pi[$ ;  $g_2(0) = g_2(\alpha_1) = g_2(\pi/2) = g_2(\alpha_2) = g_2(\pi) = 0$ ;  $g_2 = 0$ , якщо  $E_1 = E_2, v_1 = v_2$ . Якщо  $e_0$  збільшується, то  $\alpha_1, \alpha_2$  зменшуються. Значенням  $e_0$ , що дорівнюють 2; 3; 5; 10, відповідають значення  $\alpha_1$  (у градусах), які дорівнюють 38,2; 34,4; 29,3; 21,7 градусів, і значення  $\alpha_2$ , що дорівнюють 134,2; 133,4; 133,1; 131,3 градусів.

Якщо  $C < 0$  (нижче показано, що повинна виконуватись саме ця умова) і  $\alpha \in ]\alpha_1; \pi/2[ \cup ]\alpha_2; \pi[$ , то згідно з інформацією про функцію  $g_2$  та формулою, що наведені вище,  $\sigma_\theta(r, 0) \rightarrow -\infty$  при  $r \rightarrow 0$ , а тому на межі поділу середовищ біля кутової точки нормальні напруження є стискаючими. У цьому випадку внаслідок високої концентрації напружень у кутовій точці можливе зародження міжфазних зсувних тріщин, які виходять з неї, з повністю контактуючими берегами, їх довжина значно менша, ніж розміри тіла (рис. 2). Чим більше відношення модулів Юнга  $e_0 = E_1/E_2 > 1$ , тим ширша область значень кута  $\alpha$ , при яких слід очікувати утворення таких тріщин.

Вважатимемо, що тертя між берегами тріщин відсутнє. Якщо  $C < 0$  і  $\alpha \in ]0; \alpha_1[ \cup ]\pi/2; \alpha_2[$ , то на межі поділу середовищ біля кутової точки має місце висока концентрація нормальних розтягуючих напружень. У цьому випадку слід очікувати зародження відкритих тріщин. Дослідження такого випадку не є темою даної роботи. Тому розглядатимемо лише випадок  $C < 0, \alpha \in ]\alpha_1; \pi/2[ \cup ]\alpha_2; \pi[$ .

Ставиться задача визначення коефіцієнта інтенсивності напружень  $K_{II}$  у кінці  $O_1$  тріщини, установлення умови зрушення тріщин, дослідження їх рівноваги на стійкість та вивчення поведінки напружень біля кутової точки (див. рис. 2).

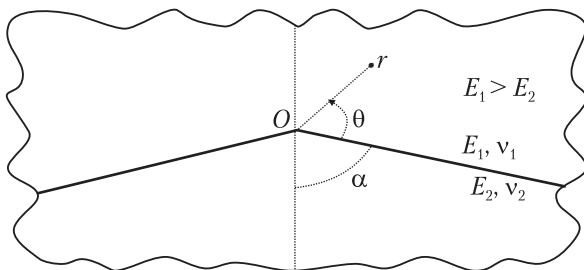


Рис. 1

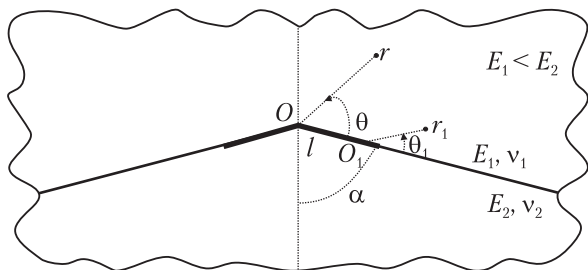


Рис. 2

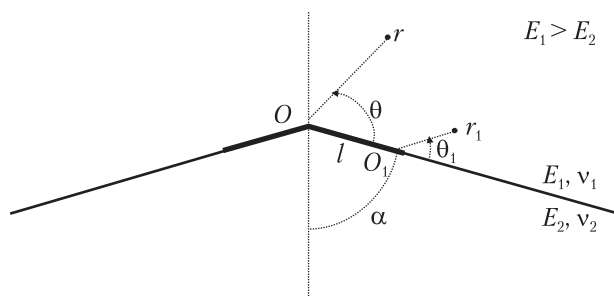


Рис. 3

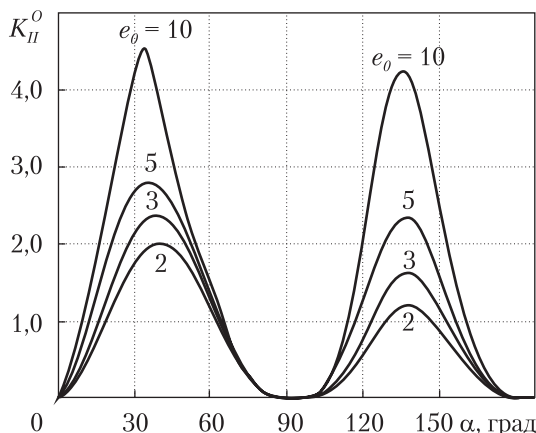


Рис. 4

При  $r_1 \rightarrow 0$  у відповідності до загальних положень про поведінку напружень біля кутових точок пружних тіл реалізується асимптотика, що являє собою розв'язок однорідної задачі теорії пружності для кусково-однорідної площини, яка містить на прямолінійній межі поділу середовищ напівнескінченну лінію розриву дотичного переміщення, що породжується коренем  $-1/2$  її характеристичного рівняння. Зокрема,

$$\sigma_{\theta_1}(r_1, \pi) \approx -\frac{K_{II} e'}{2(1+\kappa_2 e) \sqrt{2\pi r_1}} \quad (r_1 \rightarrow 0),$$

$$e' = 1 - \kappa_1 - (1 - \kappa_2)e, \quad e = \frac{1 + \nu_2}{1 + \nu_1} e_0, \quad \kappa_{1,2} = 3 - 4\nu_{1,2}.$$

Оскільки  $e' > 0$ , а контактне напруження  $\sigma_{\theta_1}(r_1, \pi)$  від'ємне, повинна виконуватись умова  $K_{II} > 0$ .

З урахуванням малості тріщин приходимо до плоскої статичної симетричної задачі теорії пружності для кусково-однорідної ізотропної площини з межею поділу середовищ у формі сторін кута, що містить розрізи скінченної довжини, які виходять з кутової точки та розташовані на цій межі (рис. 3).

На нескінченності задана асимптотика поля напружень, що являє собою розв'язок аналогічної задачі без розрізів — задачі К, про який йшлося вище. Довільна стала  $C$ , що входить до вказаного розв'язку, вважається заданою. Вона характеризує інтенсивність зовнішнього поля і повинна визначатися з розв'язку зовнішньої задачі.

Беручи до уваги симетрію, крайові умови задачі (рис. 3) запишемо так:

$$\theta = \pi - \alpha, \quad \theta = -\alpha, \quad \tau_{r\theta} = 0, \quad u_\theta = 0; \quad \theta = 0, \quad \langle \sigma_\theta \rangle = \langle \tau_{r\theta} \rangle = 0, \quad \langle u_\theta \rangle = 0; \quad (1)$$

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

$$\theta = 0, \quad r \rightarrow \infty, \quad \tau_{r\theta} = C g_1 r^{\lambda_0} + o(1/r) \quad (-\alpha \leq \theta \leq \pi - \alpha; \langle a \rangle. - \text{стрибок } a). \quad (3)$$

Розв'язок сформульованої задачі теорії пружності (рис. 3) є сумою розв'язків наступних двох задач. Перша (задача 1) відрізняється від неї тим, що замість першої з умов (2)

маємо

$$\theta = 0, \quad r < l, \quad \tau_{r\theta} = -Cg_1 r^{\lambda_0}, \quad (4)$$

а на нескінченності напруження згасають як  $o(1/r)$  (у (3) відсутній перший доданок). Друга задача — задача К. Оскільки розв'язок другої задачі відомий, достатньо побудувати розв'язок першої.

Для побудови точного розв'язку задачі 1 будемо використовувати метод Вінера — Гопфа у поєднанні з апаратом інтегрального перетворення Мелліна [10].

**Розв'язок рівняння Вінера—Гопфа.** Застосовуючи перетворення Мелліна з комплексним параметром  $p$  до рівнянь рівноваги, умов сумісності деформацій, закону Гука, умов (1) та враховуючи другу з умов (2) і умову (4), приходимо до функціонального рівняння Вінера—Гопфа

$$\Phi^+(p) + \frac{\tau}{p + \lambda_0 + 1} = A \operatorname{ctg} p \pi G(p) \Phi^-(p), \quad (5)$$

$$A = \frac{(1 + \varepsilon_1)[1 + \varepsilon_1 + (1 + \varepsilon_2)e]}{2[\varepsilon_1 + (1 + \varepsilon_1 \varepsilon_2)e + \varepsilon_2 e^2]}, \quad G(p) = \frac{G_1(p)}{G_2(p)},$$

$$G_1(p) = [\varepsilon_1 + (1 + \varepsilon_1 \varepsilon_2)e + \varepsilon_2 e^2][a_0(p) + a_1(p)e] \sin p\pi,$$

$$G_2(p) = [1 + \varepsilon_1 + (1 + \varepsilon_2)e][b_0(p) + b_1(p)e + b_2(p)e^2] \cos p\pi,$$

$$a_0(p) = (1 + \varepsilon_1)[\cos 2p(\pi - \alpha) - \cos 2\alpha](\sin 2p\alpha + p \sin 2\alpha),$$

$$a_1(p) = (1 + \varepsilon_2)(\cos 2p\alpha - \cos 2\alpha)[\sin 2p(\pi - \alpha) - p \sin 2\alpha],$$

$$b_0(p) = (\sin 2p\alpha + p \sin 2\alpha)[\varepsilon_1 \sin 2p(\pi - \alpha) + p \sin 2\alpha],$$

$$b_1(p) = (1 + \varepsilon_1)(1 + \varepsilon_2) \sin^2 p\pi - (\sin 2p\alpha + p \sin 2\alpha) \times$$

$$\times [\varepsilon_1 \sin 2p(\pi - \alpha) + p \sin 2\alpha] - [\sin 2p(\pi - \alpha) - p \sin 2\alpha](\varepsilon_2 \sin 2p\alpha - p \sin 2\alpha),$$

$$b_2(p) = [\sin 2p(\pi - \alpha) - p \sin 2\alpha](\varepsilon_2 \sin 2p\alpha - p \sin 2\alpha), \quad \tau = -Cg_1 l^{\lambda_0},$$

$$\Phi^+(p) = \int_1^{\infty} \tau_{r\theta}(\rho l, 0) \rho^p d\rho, \quad \Phi^-(p) = \frac{E_1}{4(1 - \nu_1^2)} \int_0^1 \left\langle \frac{\partial u_r}{\partial r} \right\rangle \Big|_{\substack{r=\rho l \\ \theta=0}} \rho^p d\rho$$

( $-\varepsilon_1 < \operatorname{Re} p < \varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_{1,2}$  — досить малі додатні числа).

Розв'язок рівняння (5) має вигляд

$$\Phi^+(p) = \frac{\tau K^+(p) G^+(p)}{p + \lambda_0 + 1} \left[ \frac{1}{K^+(-\lambda_0 - 1) G^+(-\lambda_0 - 1)} - \frac{1}{K^+(p) G_1^+(p)} \right] \quad (\operatorname{Re} p < 0), \quad (6)$$

$$\Phi^-(p) = \frac{\tau p G^-(p)}{AK^+(-\lambda_0 - 1) G^+(-\lambda_0 - 1) (p + \lambda_0 + 1) K^-(p)} \quad (\operatorname{Re} p > 0),$$

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

$$K^\pm(p) = \frac{\Gamma(1 \mp p)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} \mp p\right)} \quad (\Gamma(z) - \text{гамма-функція}).$$

**Дослідження граничної рівноваги тіла з тріщинами.** На основі розв'язку (6) рівняння (5) одержуємо наступну формулу для коефіцієнта інтенсивності напружень у кінці  $O_1$  тріщини:

$$K_{II} = g_1(\alpha, e_0, v_1, v_2) k(\alpha, e_0, v_1, v_2) Cl^{\lambda_0+1/2}, \quad (7)$$

$$k = \frac{2\sqrt{2}(1+\alpha_2 e) \Gamma(\lambda_0 + 3/2)}{[1+\alpha_1 + (1+\alpha_2)e] \Gamma(\lambda_0 + 2) G_1^+(-\lambda_0 - 1)}.$$

Оскільки  $K_{II} > 0$ ,  $g_1 < 0$ , повинна виконуватись умова  $C < 0$ .

Залежності безрозмірного коефіцієнта інтенсивності напружень  $K_{II}^0 = -K_{II} / (Cl^{\lambda_0+1/2})$  від кута  $\alpha$  для різних значень відношення модулів Юнга  $e_0 = E_1 / E_2 > 1$  зображено на рис. 4 ( $v_1 = v_2 = 0,3$ ).

Значенням  $e_0$ , що дорівнюють 2; 3; 5; 10, відповідають значення  $\alpha_{\max 1}$  і  $\alpha_{\max 2}$  кута  $\alpha$ , при яких функція  $K_{II}^0(\alpha)$  буде найбільшою на кожному з інтервалів  $]0; \pi/2[$ ,  $]\pi/2; \pi[$ , що дорівнюють 42,4; 37,1; 35,3; 33,5 і 139,2; 135,4; 134,1; 132,4 градусів.

З наведеної інформації випливає, що зі зростанням кута  $\alpha$  від  $\alpha_1$  до  $\pi/2$  і від  $\alpha_2$  до  $\pi$  концентрація напружень біля кінця  $O_1$  тріщини спочатку посилюється, а потім послаблюється. Значенням  $e_0$ , що дорівнюють 2; 3; 5; 10, відповідають значення кута найбільшої концентрації напружень, які дорівнюють 42,4; 37,1; 35,3; 33,5 градусів.

Чим більше відношення модулів Юнга  $e_0 = E_1 / E_2 > 1$ , тим сильніша концентрація напружень біля кінця тріщини і меншими є гострий і тупий кути максимальної концентрації напружень.

Користуючись силовим критерієм руйнування і прирівнюючи праву частину (7) до критичного значення коефіцієнта інтенсивності напружень  $K_{IIc}$ , що являє собою задану сталу, приходимо до рівняння для визначення руйнуючого навантаження

$$C = \frac{K_{IIc}}{g_1(\alpha, e_0, v_1, v_2) k(\alpha, e_0, v_1, v_2) l^{\lambda_0+1/2}}. \quad (8)$$

Зрушення тріщин відбудеться тоді, коли параметр навантаження  $C$ , зростаючи за модулем зі зростанням зовнішнього навантаження, досягне свого граничного значення, яке визначається за формулою (8).

Оскільки  $\lambda_0 > -1/2$ , з (6) знаходимо

$$\frac{\partial K_{II}}{\partial l} = (\lambda_0 + 1/2) k C g_1 l^{\lambda_0-1/2} > 0. \quad (9)$$



Використовуючи (9) і критерій стійкості рівноваги тріщин, можна сформулювати наступний висновок. Якщо у кутовій точці межі поділу ізотропних пружних середовищ зародилися міжфазні тріщини, довжина яких значно менша, ніж розміри тіла, то у випадку повного гладкого контакту берегів їх рівновага є нестійкою. Після досягнення стану граничної рівноваги режим розвитку тріщин буде динамічним.

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Банцури Р.Д. Решение первой основной задачи теории упругости для клина, имеющего конечный разрез. *Докл. АН СССР*. 1966. **167**, № 6. С. 1256–1259.
2. Сметанин Б.И. Некоторые задачи о щелях в упругом клине и слое. *Изв. АН СССР. Механика твёрдого тела*. 1968. № 2. С. 115–122.
3. Khrapkov A.A. Closed form solutions of problems on the elastic equilibrium of an infinite wedge with nonsymmetric notch at the apex. *J. Appl. Math. and Mech.* 1971. **35**, № 6. P. 1062–1069. doi: [https://doi.org/10.1016/0021-8928\(71\)90105-5](https://doi.org/10.1016/0021-8928(71)90105-5)
4. Keer L.M., Mendelsohn D.A., Achenbach J.D. Crack at the apex of a loaded notch. *Int. J. Solids and Struct.* 1977. **13**, № 7. P. 615–623. doi: [https://doi.org/10.1016/0020-7683\(77\)90044-0](https://doi.org/10.1016/0020-7683(77)90044-0)
5. Ouchterlony F. Symmetric cracking of a wedge by concentrated loads. *Int. J. Eng. Sci.* 1977. **15**, No. 2. P. 109–116. doi: [https://doi.org/10.1016/0020-7225\(77\)90026-X](https://doi.org/10.1016/0020-7225(77)90026-X)
6. Stone S.F., Westmann R.A. Stress intensity factors for cracked wedges. *Int. J. Solids and Struct.* 1981. **17**, № 3. P. 345–358. doi: [https://doi.org/10.1016/0020-7683\(81\)90068-8](https://doi.org/10.1016/0020-7683(81)90068-8)
7. Nekislykh E.M., Ostriuk V.I. Problems on elastic equilibrium of a wedge with cracks on the axis of symmetry. *Mechanics of Solids*. 2010. **45**, № 5. P. 743–756. doi: <https://doi.org/10.3103/S0025654410050109>
8. Кулиев В.Д., Работнов Ю.Н., Черепанов Г.П. Торможение трещины на границе раздела различных упругих сред. *Изв. АН СССР. Механика твёрдого тела*. 1978. № 4. С. 120–128.
9. Loboda V.V., Sheveleva A.E. Determining Prefracture Zones at a Crack Tip Between Two Elastic Orthotropic Bodies. *Int. Appl. Mech.* 2003. **39**, № 5. P. 566–572. doi: <https://doi.org/10.1023/A:1025139625891>
10. Нобл Б. Применение метода Винера–Хопфа для решения дифференциальных уравнений в частных производных. Москва: Изд-во иностр. лит., 1962. 279 с.

Надійшло до редакції 30.10.2017

#### REFERENCES

1. Bantsuri, R. D. (1966). Solution of the first fundamental problem of the theory of elasticity for a wedge having a finite cut. *Doklady Akademii nauk SSSR*, 167, No. 6, pp. 1256-1259 (in Russian).
2. Smetanin, B. I. (1968). Some problems on a cracks in an elastic wedge and a layer. *Izvestiya Akademii Nauk SSSR. Mechanics of Solids*, No. 2, pp. 115-122 (in Russian).
3. Khrapkov, A. A. (1971). Closed form solutions of problems on the elastic equilibrium of an infinite wedge with nonsymmetric notch at the apex. *J. Appl. Math. and Mech.*, 35, No. 6, pp. 1062-1069. doi: [https://doi.org/10.1016/0021-8928\(71\)90105-5](https://doi.org/10.1016/0021-8928(71)90105-5)
4. Keer, L. M., Mendelsohn, D. A. & Achenbach, J. D. (1977). Crack at the apex of a loaded notch. *Int. J. Solids and Struct.*, 13, No. 7, pp. 615-623. doi: [https://doi.org/10.1016/0020-7683\(77\)90044-0](https://doi.org/10.1016/0020-7683(77)90044-0)
5. Ouchterlony, F. (1977). Symmetric cracking of a wedge by concentrated loads. *Int. J. Eng. Sci.*, 15, No. 2, pp. 109-116. doi: [https://doi.org/10.1016/0020-7225\(77\)90026-X](https://doi.org/10.1016/0020-7225(77)90026-X)
6. Stone, S. F. & Westmann, R. A. (1981). Stress intensity factors for cracked wedges. *Int. J. Solids and Struct.*, 17, No. 3, pp. 345-358. doi: [https://doi.org/10.1016/0020-7683\(81\)90068-8](https://doi.org/10.1016/0020-7683(81)90068-8)
7. Nekislykh, E. M. & Ostriuk, V. I. (2010). Problems on elastic equilibrium of a wedge with cracks on the axis of symmetry. *Mechanics of Solids*, 45, No. 5, pp. 743-756. doi: <https://doi.org/10.3103/S0025654410050109>
8. Kuliev, V. D., Rabotnov, Yu. N. & Cherepanov, G. P. (1978). Braking of a crack at the interface of different elastic media. *Izvestiya Akademii nauk SSSR. Mechanics of Solids*, No. 4, pp. 120-128 (in Russian).
9. Loboda, V. V. & Sheveleva, A. E. (2003). Determining Prefracture Zones at a Crack Tip Between Two Elastic Orthotropic Bodies. *Int. Appl. Mech.*, 39, No. 5, pp. 566-572. doi: <https://doi.org/10.1023/A:1025139625891>

10. Nobl, B. (1962). Using of the Wiener – Hopf method for the solution the partial derivative equations. Moscow: Izda-vo Inostr. lit. (in Russian).

Received 30.10.2017

*В.М. Назаренко, А.Л. Кипнис*

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

E-mail: a.l.kipnis@gmail.com

ПРЕДЕЛЬНОЕ РАВНОВЕСИИ КУСОЧНО-ОДНОРОДНОГО УПРУГОГО ТЕЛА  
С МЕЖФАЗНЫМИ СДВИГОВЫМИ ТРЕЩИНАМИ В УГЛОВОЙ ТОЧКЕ  
ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА СРЕД

Исследовано предельное равновесие кусочно-однородного изотропного упругого тела с межфазными сдвиговыми трещинами в угловой точке границы раздела сред. Точное решение соответствующей задачи теории упругости для клиновидного тела построено методом Винера–Хопфа.

**Ключевые слова:** граница раздела сред, угловая точка, межфазные сдвиговые трещины, предельное равновесие, метод Винера–Хопфа.

*V.M. Nazarenko, A.L. Kipnis*

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

E-mail: a.l.kipnis@gmail.com

LIMIT EQUILIBRIUM OF THE PIECE-HOMOGENEOUS ELASTIC BODY  
WITH INTERFACIAL SHEAR CRACKS AT THE CORNER POINT  
OF THE MEDIA-SEPARATING BOUNDARY

The limit equilibrium of the piece-homogeneous isotropic elastic body with an interfacial shear crack at the corner point of the media-separating boundary is investigated. The exact solution of the corresponding problem of the theory of elasticity for a wedge-shaped body is constructed by the Wiener–Hopf method.

**Keywords:** media-separating boundary, corner point, interfacial shear crack, limit equilibrium, Wiener–Hopf method.

---

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.03.043>

УДК 539.3

**Л.П. Хорошун, О.И. Левчук**

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

E-mail: lkhoroshun@ukr.net

## **К основам нелинейной теории электроупругости**

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

*Предложен новый принцип построения нелинейной теории связанных процессов электроупругости. Теория базируется на уравнениях двухконтинуумной механики диэлектриков как смеси положительных и отрицательных зарядов, попарно связанных в нейтральные молекулы или элементарные ячейки. Принимается существование упругого потенциала и линейно-квадратичной зависимости парциальных напряжений от разности перемещений зарядов. Исходя из определения вектора поляризации и порождаемого им электрического поля, нелинейные уравнения двухконтинуумной механики преобразуются в уравнения электроупругости, описывающие эффекты пьезоэлектричества и электрострикции.*

**Ключевые слова:** диэлектрик, электроупругость, двухконтинуумная механика, пьезоэлектрик, электрострикция, вектор поляризации.

Применение в многочисленных приборах и установках электромеханических преобразователей, в основу которых положены пьезоэффект и эффект электрострикции, требует дальнейшего более глубокого изучения и адекватного описания закономерностей электромеханического взаимодействия. Существующая теория электроупругости [1, 2] описывает электромеханическое взаимодействие на основе уравнений статики или динамики упругого тела, уравнениях электростатики (акустическое приближение) и уравнениях состояния, связывающих тензор напряжений и вектор электрической индукции с тензором деформаций и вектором напряженности электрического поля. При этом принимается, что внутренняя энергия является функцией деформаций и электрической индукции.

Акустическое приближение не позволяет описать связанные акустические и электромагнитные динамические процессы. Кроме того, электрическая индукция [3] представляет собой заданное электрическое поле свободных зарядов независимо от нахождения в нем диэлектрика, поэтому предположение о зависимости внутренней энергии от этого поля не представляется обоснованным. Устранение этих недостатков возможно на основе двухконтинуумной механики диэлектриков как смеси положительных и отрицательных зарядов, попарно связанных в нейтральные молекулы или элементарные ячейки [4]. В настоящей работе эта теория обобщается на случай нелинейной электроупругости, связанной с эффектом электрострикции [5].

© Л.П. Хорошун, О.И. Левчук, 2018

ISSN 1025-6415. Допов. Нац. акад. наук Укр. 2018. № 3

**Нелинейные уравнения двухконтинуумной механики диэлектриков.** Рассмотрим элементарный макрообъем диэлектрика, представляющего собой совокупность взаимодействующих нейтральных молекул или элементарных ячеек [6], каждая из которых состоит из двух связанных частей — носителей положительного  $q$  и отрицательного  $-q$  зарядов или просто зарядов. В начальном состоянии плотности носителей положительных  $n_{10}$  и отрицательных  $n_{20}$  зарядов совпадают и равны числу  $N$  молекул или элементарных ячеек в единице макрообъема, т.е.  $n_{10} = n_{20} = N$ . Текущие значения плотностей носителей зарядов  $n_1, n_2$  удовлетворяют уравнениям баланса

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} + (n_1 \dot{u}_i^1),_{i=0}, \quad \frac{\partial n_2}{\partial t} + (n_2 \dot{u}_i^2),_{i=0}, \quad (1)$$

где  $\dot{u}_i^1, \dot{u}_i^2$  — векторы скоростей соответственно положительных и отрицательных зарядов, относящиеся к элементарному макрообъему, точка сверху обозначает субстанциональную производную по времени

$$\dot{u}_i^1 \equiv \frac{d_1 u_i^1}{dt} = \frac{\partial u_i^1}{\partial t} + u_{i,n}^1 \dot{u}_n^1, \quad \dot{u}_i^2 \equiv \frac{d_2 u_i^2}{dt} = \frac{\partial u_i^2}{\partial t} + u_{i,n}^2 \dot{u}_n^2. \quad (2)$$

Умножая уравнения (1) соответственно на массы положительного и отрицательного зарядов  $m_1, m_2$ , получим уравнения сохранения массы

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + (\rho_1 \dot{u}_i^1),_{i=0}, \quad \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + (\rho_2 \dot{u}_i^2),_{i=0}, \quad (3)$$

где  $\rho_1 = n_1 m_1$ ,  $\rho_2 = n_2 m_2$  — плотности массы соответственно положительных и отрицательных зарядов.

По аналогии с теорией механических смесей [7] введем парциальные напряжения  $\sigma_{ij}^1, \sigma_{ij}^2$  как составляющие равнодействующей сил, действующих соответственно на положительные и отрицательные заряды площадки диэлектрика, отнесенные к размеру площадки. Тогда уравнения сохранения импульса положительных и отрицательных зарядов, отнесенные к элементарному макрообъему диэлектрика, можно представить в виде

$$\rho_1 \dot{u}_i^1 = \sigma_{ij,j}^1 + R_i + F_i^1, \quad \rho_2 \dot{u}_i^2 = \sigma_{ij,j}^2 - R_i + F_i^2, \quad (4)$$

где  $R_i$  — результирующая сила взаимодействия между положительными и отрицательными зарядами, отнесенная к элементарному макрообъему;  $F_i^1, F_i^2$  — внешние объемные силы, действующие на соответствующие заряды;  $\dot{u}_i^1, \dot{u}_i^2$  — субстанциональные производные по времени от скоростей

$$\ddot{u}_i^1 \equiv \frac{d_1 \dot{u}_i^1}{dt} = \frac{\partial \dot{u}_i^1}{\partial t} + \dot{u}_{i,n}^1 \dot{u}_n^1, \quad \ddot{u}_i^2 \equiv \frac{d_2 \dot{u}_i^2}{dt} = \frac{\partial \dot{u}_i^2}{\partial t} + \dot{u}_{i,n}^2 \dot{u}_n^2. \quad (5)$$

Балансовые уравнения (3), (4) необходимо дополнить уравнениями состояния, связывающими динамические и кинематические параметры. Будем считать диэлектрик идеально упругим. По аналогии с классической теорией упругости [8] находим

$$\int_V (\dot{T} + \dot{U}) dV = \int_V (F_i^1 \dot{u}_i^1 + F_i^2 \dot{u}_i^2) dV + \int_S (\sigma_{ij}^1 n_j \dot{u}_i^1 + \sigma_{ij}^2 n_j \dot{u}_i^2) dS, \quad (6)$$

где  $n_j$  — направляющие косинусы нормали к поверхности  $S$ , а кинетическая энергия  $T$  и скорость приращения внутренней энергии  $\dot{U}$  определяются формулами

$$T = \frac{1}{2}(\rho_1 \dot{u}_i^1 \dot{u}_i^1 + \rho_2 \dot{u}_i^2 \dot{u}_i^2), \quad \dot{U} = \sigma_{ij}^1 \dot{\varepsilon}_{ij}^1 + \sigma_{ij}^2 \dot{\varepsilon}_{ij}^2 - R_i (\dot{u}_i^1 - \dot{u}_i^2), \quad \varepsilon_{ij}^k = \frac{1}{2}(u_{i,j}^k + u_{j,i}^k) \quad (k=1, 2). \quad (7)$$

Отсюда следует, что внутренняя энергия  $U$  является функцией кинематических параметров  $\varepsilon_{ij}^1, \varepsilon_{ij}^2, u_i^1 - u_i^2$ , а динамические параметры  $\sigma_{ij}^1, \sigma_{ij}^2, R_i$  определяются производными

$$\sigma_{ij}^1 = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}^1}, \quad \sigma_{ij}^2 = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}^2}, \quad R_i = -\frac{\partial U}{\partial (u_i^1 - u_i^2)}. \quad (8)$$

Если принять зависимость внутренней энергии от кинематических параметров в виде

$$\begin{aligned} U = & \frac{1}{2} \lambda_{ijmn}^{11} \varepsilon_{ij}^1 \varepsilon_{mn}^1 + \lambda_{ijmn}^{12} \varepsilon_{ij}^1 \varepsilon_{mn}^2 + \frac{1}{2} \lambda_{ijmn}^{22} \varepsilon_{ij}^2 \varepsilon_{mn}^2 + h_{mij}^1 \varepsilon_{ij}^1 (u_m^1 - u_m^2) + \\ & + h_{mij}^2 \varepsilon_{ij}^2 (u_m^1 - u_m^2) + \frac{1}{2} \kappa_{ij} (u_i^1 - u_i^2) (u_j^1 - u_j^2) - \frac{1}{2} h_{mnij}^1 \varepsilon_{ij}^1 (u_m^1 - u_m^2) (u_n^1 - u_n^2) - \\ & - \frac{1}{2} h_{mnij}^2 \varepsilon_{ij}^2 (u_m^1 - u_m^2) (u_n^1 - u_n^2) \end{aligned} \quad (9)$$

и ввести замену

$$u_i^1 = u_i + u_i', \quad u_i^2 = u_i - u_i', \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ij}^1 + \sigma_{ij}^2, \quad \sigma'_{ij} = \sigma_{ij}^1 - \sigma_{ij}^2, \quad (10)$$

то уравнения (3), (4) и выражения (7)–(9) преобразуются соответственно к виду

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\rho \dot{u}_i + \rho' \dot{u}_i'),_i = 0, \quad \frac{\partial \rho'}{\partial t} + (\rho' \dot{u}_i + \rho \dot{u}_i'),_i = 0, \quad (11)$$

$$\rho \ddot{u}_i + \rho' \ddot{u}_i' = \sigma_{ij,j} + F_i, \quad \rho' \ddot{u}_i + \rho \ddot{u}_i' = \sigma'_{ij,j} + 2R_i + F_i', \quad (12)$$

$$\begin{aligned} T = & \frac{1}{2} \rho (\dot{u}_i \dot{u}_i + \dot{u}_i' \dot{u}_i') + \rho' \dot{u}_i \dot{u}_i', \quad U = \frac{1}{2} \lambda_{ijmn}^* \varepsilon_{ij} \varepsilon_{mn} + \bar{\lambda}_{ijmn} \varepsilon_{ij} \varepsilon'_{mn} + \frac{1}{2} \lambda_{ijmn} \varepsilon'_{ij} \varepsilon'_{mn} + \\ & + h_{mij}^* \varepsilon_{ij} u'_m + h'_{mij} \varepsilon'_{ij} u'_m + 2\kappa_{ij} u'_i u'_j - h_{mnij}^* \varepsilon_{ij} u'_m u'_n - h'_{mnij} \varepsilon'_{ij} u'_m u'_n; \end{aligned} \quad (13)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}} = \lambda_{ijmn}^* \varepsilon_{mn} + \bar{\lambda}_{ijmn} \varepsilon'_{mn} + h_{mij}^* u'_m - h'_{mnij} u'_m u'_n,$$

$$\sigma'_{ij} = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon'_{ij}} = \bar{\lambda}_{mnij} \varepsilon_{mn} + \lambda_{ijmn} \varepsilon'_{mn} + h'_{mij} u'_m - h_{mnij} u'_m u'_n,$$

$$2R_i = -\frac{\partial U}{\partial u_i'} = -4\kappa_{ij} u'_j - h_{imn}^* \varepsilon_{mn} - h'_{imn} \varepsilon'_{mn} + 2h_{ijmn}^* u'_j \varepsilon_{mn} + 2h'_{ijmn} u'_j \varepsilon'_{mn}, \quad (14)$$

где введены обозначения

$$\ddot{u}_i = \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial t} + \dot{u}_{i,n} \dot{u}_n + \dot{u}'_{i,n} \dot{u}'_n, \quad \ddot{u}'_i = \frac{\partial \dot{u}'_i}{\partial t} + \dot{u}_{i,n} \dot{u}'_n + \dot{u}'_{i,n} \dot{u}_n,$$

$$\dot{u}_i = \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_{i,n} \dot{u}_n + u'_{i,n} \dot{u}'_n, \quad \dot{u}'_i = \frac{\partial u'_i}{\partial t} + u_{i,n} \dot{u}'_n + u'_{i,n} \dot{u}_n,$$

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{ij} &= \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}), \quad \varepsilon'_{ij} = \frac{1}{2}(u'_{i,j} + u'_{j,i}), \quad F_i = F_i^1 + F_i^2, \quad F'_i = F_i^1 - F_i^2, \\
\lambda_{ijmn}^* &= \lambda_{ijmn}^{11} + \lambda_{ijmn}^{21} + 2\lambda_{ijmn}^{12}, \quad \bar{\lambda}_{ijmn} = \lambda_{ijmn}^{11} - \lambda_{ijmn}^{22}, \\
\lambda_{ijmn} &= \lambda_{ijmn}^{11} + \lambda_{ijmn}^{22} - 2\lambda_{ijmn}^{12}, \quad h_{imn}^* = 2(h_{imn}^1 + h_{imn}^2), \\
h'_{imn} &= 2(h_{imn}^1 - h_{imn}^2), \quad h_{ijmn}^* = 2(h_{ijmn}^1 + h_{ijmn}^2), \quad h'_{ijmn} = 2(h_{ijmn}^1 - h_{ijmn}^2), \\
\rho &= \rho_1 + \rho_2, \quad \rho' = \rho_1 - \rho_2,
\end{aligned} \tag{15}$$

Подставляя (14) в (12), приходим к системе связанных динамических уравнений относительно перемещений нейтральных молекул

$$u_i = \frac{1}{2}(u_i^1 + u_i^2)$$

и половины взаимных смещений

$$u'_i = \frac{1}{2}(u_i^1 - u_i^2)$$

положительных и отрицательных зарядов

$$\begin{aligned}
\rho \ddot{u}_i + \rho' \dot{u}'_i &= \lambda_{ijmn}^* u_{m,nj} + \bar{\lambda}_{ijmn} u'_{m,nj} + h_{mnij}^* u'_{m,j} - h_{mnij}^* (u'_m u'_n)_{,j} + F_i, \\
\rho' \ddot{u}_i + \rho \dot{u}'_i &= \bar{\lambda}_{mnij} u_{m,nj} + \lambda_{ijmn} u'_{m,nj} - h_{imn}^* u_{m,n} + h_{mij} u'_{m,j} - 4\kappa_{ij} u'_j + 2h_{ijmn}^* u'_j u_{m,n} + \\
&+ 2h_{ijmn} u'_j u'_{m,n} + F'_i \quad (h_{mij} = h'_{mij} - h'_{imj}, \quad h_{ijmn} = h'_{ijmn} - h'_{jmin}).
\end{aligned} \tag{16}$$

Для изотропных диэлектриков уравнения (16) принимают вид

$$\begin{aligned}
\rho \ddot{u}_i + \rho' \dot{u}'_i &= \mu^* u_{i,rr} + (\lambda^* + \mu^*) u_{r,ri} + \bar{\mu} u'_{i,rr} + (\bar{\lambda} + \bar{\mu}) u'_{r,ri} - h^* (u'_n u'_n)_{,i} - 2l^* (u'_i u'_n)_{,n} + F_i, \\
\rho' \ddot{u}_i + \rho \dot{u}'_i &= \bar{\mu} u_{i,rr} + (\bar{\lambda} + \bar{\mu}) u_{r,ri} + \mu u'_{i,rr} + (\lambda + \mu) u'_{r,ri} - 4\kappa u'_i + 2h^* u'_i u_{n,n} + \\
&+ 2l^* u'_n (u_{i,n} + u_{n,i}) + 2(h' - l') (u'_i u'_{n,n} - u'_n u'_{n,i}) + F'_i,
\end{aligned} \tag{17}$$

где  $\lambda^*, \mu^*, \bar{\lambda}, \bar{\mu}, \lambda, \mu, h^*, l^*, h, l, \kappa$  — постоянные материала.

Полученные уравнения можно упростить, если не детализировать структуру атома, молекулы или элементарной ячейки, а считать, что заряды симметричны, т.е. материальные тензоры не зависят от перестановки зарядов местами. В этом случае следует положить  $\lambda_{ijmn}^{11} = \lambda_{ijmn}^{22}$ ,  $h_{ijmn}^1 = h_{ijmn}^2$ ,  $h_{imn}^1 = h_{imn}^2$ , что приводит к равенствам  $\bar{\lambda}_{ijmn} = 0$ ,  $h'_{ijmn} = 0$ ,  $h'_{imn} = 0$ . В результате определяющие уравнения (14), а также динамические уравнения в перемещениях (16), (17), соответственно упрощаются

$$\begin{aligned}
\sigma_{ij} &= \lambda_{ijmn}^* \varepsilon_{mn} + h_{mij}^* u'_m - h_{mnij}^* u'_m u'_n, \\
\sigma'_{ij} &= \lambda_{ijmn} \varepsilon'_{mn}, \\
2R_i &= -4\kappa_{ij} u'_j - h_{imn}^* \varepsilon_{mn} + 2h_{ijmn}^* u'_j \varepsilon_{mn},
\end{aligned} \tag{18}$$

$$\begin{aligned} \rho \ddot{u}_i + \rho' \dot{u}'_i &= \lambda_{ijmn}^* u_{m,nj} + h_{mij}^* u'_{m,j} - h_{mnij}^* (u'_m u'_n)_{,j} + F_i, \\ \rho' \ddot{u}_i + \rho \ddot{u}'_i &= \lambda_{ijmn} u'_{m,nj} - h_{imn}^* u_{m,n} - 4\kappa_{ij} u'_j + 2h_{ijmn}^* u'_j u_{m,n} + F'_i; \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \rho \ddot{u}_i + \rho' \dot{u}'_i &= \mu^* u_{i,rr} + (\lambda^* + \mu^*) u_{r,ri} - h^* (u'_n u'_n)_{,i} - 2l^* (u'_i u'_n)_{,n} + F_i, \\ \rho' \ddot{u}_i + \rho \ddot{u}'_i &= \mu u_{i,rr} + (\lambda + \mu) u'_{r,ri} - 4\kappa u'_i + 2h^* u'_i u_{n,n} + 2l^* u'_n (u_{i,n} + u_{n,i}) + F'_i. \end{aligned} \quad (20)$$

Из уравнений (20) для изотропного упругого диэлектрика следует, как предельный случай, уравнения для идеально жидкого или газообразного диэлектрика. Для этого необходимо положить  $\mu^* = 0$ ,  $l^* = 0$ , в результате чего будем иметь

$$\begin{aligned} \rho \ddot{u}_i + \rho' \dot{u}'_i &= -p_{,i} + F_i \quad (p = p_0 - \lambda^* u_{r,r} + h^* u'_n u'_n), \\ \rho' \ddot{u}_i + \rho \ddot{u}'_i &= \mu u'_{i,rr} + (\lambda + \mu) u'_{r,ri} - 4\kappa u'_i + 2h^* u'_i u_{n,n} + F'_i, \end{aligned} \quad (21)$$

где  $p$ ,  $p_0$  — давление соответственно в возмущенном и покоящемся жидком диэлектрике.

**Переход к связанным уравнениям механики и электричества.** Умножим уравнения баланса плотностей носителей зарядов (1) соответственно на заряды  $q$ ,  $-q$  и сложим. В результате с учетом (10) получим закон сохранения электрического заряда

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + I_{i,i} = 0, \quad (22)$$

где обозначено

$$\rho_e = (n_1 - n_2)q, \quad I_i = I_i^{кон} + I_i^{пол}, \quad I_i^{кон} = \rho_e \dot{u}_i, \quad I_i^{пол} = (n_1 + n_2)q \dot{u}'_i, \quad (23)$$

где  $\rho_e$  — плотность поляризационных или связанных зарядов, являющаяся полной плотностью ввиду отсутствия свободных зарядов;  $I_i^{кон}$  — конвекционный ток, обусловленный перемещением поляризационных зарядов;  $I_i^{пол}$  — ток поляризации или скорость поляризации.

Если принять, что в начальный момент времени плотности носителей связанных зарядов совпадают ( $n_{10} = n_{20} = N$ ), то, интегрируя уравнение (22) по времени, в линейном приближении получим известное уравнение

$$\rho_e + P_{i,i} = 0, \quad (24)$$

где вектор поляризации  $P_i$  определяется формулой

$$P_i = 2Nq u'_i. \quad (25)$$

Плотность поляризационных электрических зарядов  $\rho_e$  порождает электрическое поле  $E_i$ , которое, согласно теореме Гаусса [3, 6], определяется в вакууме формулой

$$E_{i,i} = 4\pi k \rho_e \quad (26)$$

где

$$k = 1 \quad \text{и} \quad k = \frac{1}{4\pi \epsilon_0}$$

соответственно в системах СГС и СИ. Подставляя (24) в (26), приходим к уравнению

$$(E_i + 4\pi k P_i)_{,i} = 0, \quad (27)$$

решение которого в общем случае имеет вид

$$E_i = -4\pi k P_i. \quad (28)$$

Поляризация, порождаемая взаимным смещением связанных зарядов, может быть вызвана различными факторами – внешним электрическим полем или полем свободных зарядов, инерционными силами, деформациями диэлектрика, изменением температуры. Если предположить, что диэлектрик находится во внешнем статическом электрическом поле  $E_i^B$ , связанным с некоторой плотностью свободных электрических зарядов  $\rho_e^B$  согласно теореме Гаусса

$$E_{i,i}^B = 4\pi \rho_e^B, \quad (29)$$

а другие факторы, вызывающие поляризацию отсутствуют, то, согласно опытному закону [3, 6], вектор поляризации единицы объема определяется формулами

$$P_i = \beta E_i^*, \quad P_i = \epsilon_0 \beta E_i^*, \quad (E_i^* = E_i^B + E_i) \quad (30)$$

соответственно в системах СГС и СИ, где  $\beta$  – поляризуемость или электрическая восприимчивость единицы объема диэлектрика. Тогда из (28)–(30) следует известное уравнение для вектора  $D_i$  так называемой электрической индукции, имеющее в системах СГС и СИ соответственно вид

$$D_{i,i} = 4\pi \rho_e^B \quad (D_i = E_i^* + 4\pi P_i = \chi E_i^*, \quad \chi = 1 + 4\pi\beta), \quad (31)$$

$$D_{i,i} = \rho_e^B \quad (D_i = \epsilon_0 E_i^* + P_i = \epsilon_0 \chi E_i^*, \quad \chi = 1 + \beta), \quad (32)$$

где  $\chi$  – диэлектрическая проницаемость.

Как видим, согласно (28)–(32), имеют место равенства

$$D_i = E_i^B, \quad D_i = \epsilon_0 E_i^B \quad (33)$$

соответственно в системах СГС и СИ, т.е. вектор электрической индукции [3] – это просто заданная напряженность внешнего электрического поля или пропорциональная ему величина.

Если в диэлектрике происходят динамические процессы, то на связанные заряды действуют также инерционные силы, в результате чего перестают быть справедливыми соотношения (30)–(32). В этом случае для определения вектора поляризации  $P_i$  или порождаемого им, согласно (28), электрического поля  $E_i$  необходимо строить динамические уравнения

На основе соотношений (25), (28) находим

$$u'_i = \frac{1}{2Nq} P_i = -v E_i \quad \left( v = \frac{1}{8\pi k Nq} \right). \quad (34)$$

Объемные силы  $F_i^1, F_i^2$  представим в виде суммы механических и пондеромоторных составляющих, обусловленных электрическим полем, т.е.

$$F_i^1 = \bar{F}_i^1 + \bar{\bar{F}}_i^1, \quad F_i^2 = \bar{F}_i^2 + \bar{\bar{F}}_i^2, \quad \bar{\bar{F}}_i^1 = -\bar{\bar{F}}_i^2 = Nqk(E_i + E_i^B), \quad (35)$$



где  $E_i^B$  – заданная напряженность внешнего электрического поля. Тогда, приняв  $\bar{F}_i^1 = \bar{F}_i^2$ , согласно (15), имеем

$$F_i = \bar{F}_i^1 + \bar{F}_i^2, \quad F_i' = \bar{F}_i' = 2Nqk(E_i + E_i^B). \quad (36)$$

Подставляя (34)–(36) в (13), (18)–(21), получим выражения кинетической и внутренней энергии

$$T = \frac{1}{2}\rho(\dot{u}_i\dot{u}_i + v^2\dot{E}_i\dot{E}_i) - v\rho'\dot{u}_i\dot{E}_i, \quad U = \frac{1}{2}\lambda_{ijmn}^*\epsilon_{ij}\epsilon_{mn} + \frac{1}{2}v^2\lambda_{ijmn}E_{ij}E_{mn} - \\ - v h_{mij}^*\epsilon_{ij}E_m + 2v^2\kappa_{ij}E_iE_j - v^2 h_{mnij}^*\epsilon_{ij}E_mE_n \quad \left( E_{ij} = \frac{1}{2}(E_{i,j} + E_{j,i}) \right), \quad (37)$$

уравнения состояния

$$\sigma_{ij} = \lambda_{ijmn}^*\epsilon_{mn} - v h_{mij}^*E_m - v^2 h_{mnij}^*E_mE_n, \\ \sigma'_{ij} = -v\lambda_{ijmn}E_{mn}, \\ 2R_i = 4v\kappa_{ij}E_j - h_{imn}^*\epsilon_{mn} - 2v h_{ijmn}^*E_j\epsilon_{mn}, \quad (38)$$

динамические нелинейные уравнения электроупругости соответственно для анизотропно-го и изотропного диэлектриков

$$\rho\ddot{u}_i - v\rho'\ddot{E}_i = \lambda_{ijmn}^*u_{m,nj} - v h_{mij}^*E_{m,j} - v^2 h_{mnij}^*(E_mE_n)_{,j} + F_i, \\ \rho'\ddot{u}_i - v\rho\ddot{E}_i = -h_{imn}^*u_{m,n} - v(\lambda_{ijmn}E_{m,nj} - 4\kappa_{ij}^*E_j + 2h_{ijmn}^*E_ju_{m,n}) + 2NqkE_i^B, \quad (39)$$

$$\rho\ddot{u}_i - v\rho'\ddot{E}_i = \mu^*u_{i,rr} + (\lambda^* + \mu^*)u_{r,ri} - v^2[h^*(E_nE_n)_{,i} + 2l^*(E_iE_n)_{,n}] + F_i, \\ \rho'\ddot{u}_i - v\rho\ddot{E}_i = -v[\mu E_{i,rr} + (\lambda + \mu)E_{r,ri} - 4\kappa^*E_i + 2h^*E_iu_{n,n} + 2l^*E_n(u_{i,n} + u_{n,i})] + 2NqkE_i^B, \quad (40)$$

а также уравнения электрогидромеханики для идеально жидкого диэлектрика

$$\rho\ddot{u}_i - v\rho'\ddot{E}_i = -p_{,i} + F_i \quad (p = p_0 - \lambda^*u_{r,r} + v^2h^*E_nE_n), \\ \rho'\ddot{u}_i - v\rho\ddot{E}_i = -v[\mu E_{i,rr} + (\lambda + \mu)E_{r,ri} - 4\kappa^*E_i + 2h^*E_iu_{n,n}] + 2NqkE_i^B, \quad (41)$$

где

$$\ddot{u}_i = \frac{\partial \dot{u}_i}{\partial t} + \dot{u}_{i,n}\dot{u}_n + v^2\dot{E}_{i,n}\dot{E}_n; \quad \ddot{E}_i = \frac{\partial \dot{E}_i}{\partial t} + \dot{u}_{i,n}\dot{E}_n + \dot{E}_{i,n}\dot{u}_n, \\ \dot{u}_i = \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_{i,n}\dot{u}_n + v^2E_{i,n}\dot{E}_n; \quad \dot{E}_i = \frac{\partial E_i}{\partial t} + u_{i,n}\dot{E}_n + E_{i,n}\dot{u}_n; \\ \kappa_{ij}^* = \kappa_{ij} + 4\pi k N^2 q^2 \delta_{ij}; \quad \kappa^* = \kappa + 4\pi k N^2 q^2. \quad (42)$$

К уравнениям (39)–(42) необходимо присоединить уравнения сохранения массы, которые, как следует из (3), (10), (34), имеют вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\rho \dot{u}_i - \nu \rho' \dot{E}_i), \quad i = 0, \quad \frac{\partial \rho'}{\partial t} + (\rho' \dot{u}_i - \nu \rho \dot{E}_i), \quad i = 0. \quad (43)$$

Уравнения (39)–(43) инвариантны относительно преобразований Галилея.

Дифференциальные уравнения (39)–(41) описывают связанные динамические процессы механических перемещений нейтральных частиц диэлектрика и изменений электрического поля, обусловленного поляризациями. Линейные слагаемые с коэффициентами  $h_{mij}^*$  описывают пьезоэлектрические эффекты, а нелинейные слагаемые с коэффициентами  $h_{mnij}^*$ ,  $h^*$ ,  $l^*$  — эффекты электрострикции.

Пьезоэлектрический эффект, описываемый в уравнениях (38), (39) слагаемыми с коэффициентами  $h_{imn}^*$ , проявляется только в твердых диэлектриках, кристаллическая решетка которых не имеет центра симметрии. В пьезоэлектрических преобразователях, применяемых в технике, наиболее широкое распространение получила предварительно поляризованная пьезокерамика, имеющая трансверсально-изотропную симметрию электроупругих свойств. Если ось  $x_3$  направить вдоль оси симметрии такого материала, то уравнения состояния (38) будут иметь вид

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= (\lambda_{11}^* - \lambda_{12}^*) \varepsilon_{ij} + (\lambda_{12}^* \varepsilon_{kk} + \lambda_{13}^* \varepsilon_{33} - \nu h_{31}^* E_3) \delta_{ij} - \nu^2 [(h_{11}^* - h_{12}^*) E_i E_j + (h_{12}^* E_k E_k + h_{31}^* E_3^2) \delta_{ij}], \\ \sigma_{33} &= \lambda_{13}^* \varepsilon_{kk} + \lambda_{33}^* \varepsilon_{33} - \nu h_{33}^* E_3 - \nu^2 (h_{31}^* E_k E_k + h_{33}^* E_3^2), \\ \sigma_{i3} &= 2\lambda_{44}^* \varepsilon_{i3} - \nu h_{15}^* E_i - 2\nu^2 h_{55}^* E_i E_3, \\ \sigma'_{ij} &= -\nu [(\lambda_{11} - \lambda_{12}) E_{ij} + (\lambda_{12} E_{kk} + \lambda_{13} E_{33}) \delta_{ij}], \\ \sigma'_{33} &= -\nu (\lambda_{13} E_{kk} + \lambda_{33} E_{33}), \quad \sigma'_{i3} = -2\nu \lambda_{44} E_{i3}, \\ 2R_i &= 4\nu \kappa_{11} E_i - 2h_{15}^* \varepsilon_{i3} - 2\nu [(h_{11}^* - h_{12}^*) \varepsilon_{ij} E_j + (h_{12}^* \varepsilon_{kk} + h_{13}^* \varepsilon_{33}) E_i], \\ 2R_3 &= 4\nu \kappa_{33} E_3 - (h_{31}^* \varepsilon_{kk} + h_{33}^* \varepsilon_{33}) - 2\nu (2h_{55}^* \varepsilon_{i3} E_i + h_{31}^* \varepsilon_{kk} E_3 + h_{33}^* \varepsilon_{33} E_3) \quad (i, j, k = 1, 2), \quad (44) \end{aligned}$$

где для электроупругих постоянных  $\lambda_{ijmn}^*$ ,  $\lambda_{ijmn}$ ,  $h_{ijmn}^*$ ,  $h_{imn}^*$  приняты матричные обозначения [2].

Подставляя (35), (36) и (44) в уравнения сохранения импульса (12), с учетом (42) получим

$$\begin{aligned} \rho \ddot{u}_i - \nu \rho' \ddot{E}_i &= \frac{1}{2} (\lambda_{11}^* - \lambda_{12}^*) u_{i, kk} + \frac{1}{2} (\lambda_{11}^* + \lambda_{12}^*) u_{k, ki} + (\lambda_{13}^* + \lambda_{44}^*) u_{3, 3i} + \\ &+ \lambda_{44}^* u_{i, 33} - \nu (h_{31}^* E_{3, i} + h_{15}^* E_{i, 3}) - \nu^2 [(h_{11}^* - h_{12}^*) (E_i E_j)_{, j} + h_{12}^* (E_k E_k)_{, i} + \\ &+ h_{31}^* (E_3^2)_{, i} + 2h_{55}^* (E_i E_3)_{, 3}] + F_i, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \rho \ddot{u}_3 - \nu \rho' \ddot{E}_3 &= \lambda_{44}^* u_{3,kk} + (\lambda_{13}^* + \lambda_{44}^*) u_{k,k3} + \lambda_{33}^* u_{3,33} - \nu (h_{15}^* E_{k,k} + h_{33}^* E_{3,3}) - \\
 &- \nu^2 [2h_{55}^* (E_{k,k} E_3 + E_i E_{3,i}) + h_{31}^* (E_k E_k)_{,3} + h_{33}^* (E_3^2)_{,3}] + F_3, \\
 \rho' \ddot{u}_i - \nu \rho \ddot{E}_i &= -h_{15}^* (u_{i,3} + u_{3,i}) - \nu \left[ \frac{1}{2} (\lambda_{11} - \lambda_{12}) E_{i,kk} + \frac{1}{2} (\lambda_{11} + \lambda_{12}) E_{k,ki} + \right. \\
 &+ (\lambda_{13} + \lambda_{44}) E_{3,3i} + \lambda_{44} E_{i,33} - 4\kappa_{11}^* E_i + (h_{11}^* - h_{12}^*) (u_{i,j} + u_{j,i}) E_j + \\
 &+ 2(h_{12}^* u_{k,k} + h_{13}^* u_{3,3}) E_i \left. \right] + 2Nqk E_i^B, \\
 \rho' \ddot{u}_3 - \nu \rho \ddot{E}_3 &= -h_{31}^* u_{k,k} - h_{33}^* u_{3,3} - \nu [\lambda_{44} E_{3,kk} + (\lambda_{13} + \lambda_{44}) E_{k,k3} + \\
 &+ \lambda_{33} E_{3,33} - 4\kappa_{33}^* E_3 + 2h_{55}^* (u_{i,3} + u_{3,i}) E_i + 2h_{31}^* u_{k,k} E_3 + 2h_{33}^* u_{3,3} E_3] + 2Nqk E_3^G. \quad (45)
 \end{aligned}$$

Уравнения (45) инвариантны относительно преобразований Галилея. Если же пренебречь нелинейными инерционными слагаемыми, т.е. вместо (42) принять

$$\ddot{u}_i = \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}, \quad \ddot{E}_i = \frac{\partial^2 E_i}{\partial t^2}$$

в левых частях уравнений (45), то они теряют инвариантность относительно преобразований Галилея. В случае изотропных диэлектриков из (40), (41) как частный случай следуют уравнения Максвелла.

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Гринченко В.Т., Улитко А.Ф., Шульга Н.А. Механика связанных полей в элементах конструкций. Электроупругость. Т.5. Киев: Наук. думка, 1989. 280 с.
2. Хорошун Л.П., Маслов Б.П., Лещенко П.В. Прогнозирование эффективных свойств пьезоактивных композитных материалов. Киев: Наук. думка, 1989. 208 с.
3. Пановский В., Филипс М. Классическая электродинамика. Москва: Физматиз, 1963. 432 с.
4. Khoroshun L.P. General Dynamic Equations of Electromagnetomechanics for Dielectrics and Piezoelectrics. *Int. Appl. Mech.* 2006. **42**, № 4. P.407–420.
5. Wen C.-W., Weng G.J. Theoretical approach to effective electrostriction in inhomogeneous materials. *Phys. Rev. B* 2000. **61**, № 1. P. 258–265.
6. Тамм И.Е. Основы теории электричества. Москва: Наука, 1976. 616 с.
7. Хорошун Л.П., Солтанов Н.С. Термоупругость двухкомпонентных смесей. — Киев: Наук. думка, 1984. — 112с.
8. Новацкий В. Теория упругости. Москва: Мир, 1975. — 872 с.

Поступило в редакцию 06.11.2017

#### REFERENCES

1. Grinchenko, V. T., Ulitko, A. F. & Shulga, N. A. (1989). *Mechanika Sviazannykh Polej v Elementakh Konstruktsij. Electrouprugost. 5*, Kiev: Naukova Dumka (in Russian).
2. Khoroshun, L. P., Maslov, B. P. & Leschenko, P. V. (1989). *Prognozirovanie Effektivnykh Svoystv Piezoaktivnykh Kompozitnykh Materialov*. Kiev: Naukova Dumka, (in Russian).
3. Panovskiy, V. & Filips, M. (1963). *Klassicheskaja Electrodinamika*. Moscow: Fizmatgiz (in Russian).
4. Khorohun, L. P. (2006). General Dynamic Equations of Electromagnetomechanics for Dielectrics and Piezoelectrics. *Int. Appl. Mech.*, 42, No. 4, pp. 407-420.

5. Wen, C.-W. & Weng, G.J. (2000). Theoretical approach to effective electrostriction in inhomogeneous materials. Phys. Rev. B., 61, No. 1, pp. 258-265.
6. Tamm, I. E. (1976). *Osnovy Teorii Elektrichestva*. Moscow: Nauka (in Russian).
7. Khoroshun, L. P. & Soltanov, N. S. (1984). *Termouprugost Dvukhkomponentnykh Smesej*. Kiev: Naukova Dumka (in Russian).
8. Novatskiy, V. (1975). *Teoriya Uprugosti*. Moscow: Mir (in Russian).

Received 06.11.2017

Л.П. Хорошун, О.І. Левчук

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

E-mail: lkhoshun@ukr.net

#### ДО ОСНОВ НЕЛІНІЙНОЇ ТЕОРІЇ ЕЛЕКТРОПРУЖНОСТІ

Запропоновано новий принцип побудови нелінійної теорії зв'язаних динамічних процесів електропружності. Теорія базується на рівняннях двоконтинуумної механіки діелектриків як суміші позитивних і негативних зарядів, попарно зв'язаних у нейтральні молекули чи елементарні комірки. Приймається існування пружного потенціалу і лінійно-квадратичної залежності парціальних напружень від різниці переміщення зарядів. Виходячи з визначення вектора поляризації і породжуваного ним електричного поля, нелінійні рівняння двоконтинуумної механіки перетворюються в рівняння електропружності, які описують ефекти п'єзоелектрики і електрострикції.

**Ключові слова:** діелектрик, електропружність, двоконтинуумна механіка, п'єзоелектрик, електрострикція, вектор поляризації.

L.P. Khoroshun, O.I. Levchuk

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

E-mail: lkhoshun@ukr.net

#### TO THE BASES OF THE NONLINEAR THEORY OF ELECTROELASTICITY

A new principle is proposed for constructing a nonlinear theory of coupled dynamical processes of electroelasticity. The theory is based on the equations of the two-continuum mechanics of dielectrics as a mixture of positive and negative charges in pairs, which form neutral molecules or elementary cells. The existence of an elastic potential and the linear-quadratic dependence of partial stresses on the difference of displacements of charges is accepted. Based on the definitions of a polarization vector and an associated electric field, the equations of the two-continuum mechanics are transformed into equations of electroelasticity, which describe the piezoelectric and electrostriction effects.

**Keywords:** dielectric, electroelasticity, two-continuum mechanics, piezoelectric, electrostriction, polarization vector.

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.03.053>

УДК 517.36

**А.С. Хорошун**

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

E-mail: khoroshunanatoliy@gmail.com

## О построении управления поступательным движением вращением эксцентрикового маховика

*Представлено академиком НАН Украины А.А. Мартынюком*

*Рассмотрен пример малоприводной механической системы TORA. Получен в явном виде закон управления вращением эксцентрикового маховика, который обеспечивает стабилизацию положения равновесия TORA.*

**Ключевые слова:** малоприводная механическая система, глобальная асимптотическая устойчивость, эксцентриковый маховик, положение равновесия.

Малоприводные механические системы (ММС) характеризуются тем, что количество управляющих входов в такой системе меньше, чем количество переменных, описывающих поведение. Системы такого класса широко используются при конструировании различных роботов, аэрокосмических и морских аппаратов (см. [1]), поскольку имеют преимущество в меньшем потреблении энергии и меньшей стоимости.

В работе [2] рассмотрен пример ММС и получен закон управления, обеспечивающий глобальную асимптотическую устойчивость состояния равновесия этой системы, а также получена оценка области в пространстве параметров модели, при всех значениях параметров из которой построенное управление также реализует поставленную задачу.

В данной статье рассмотрена ММС, имеющая сходную математическую природу с моделью спутника с двойным вращением (см. [3]), которая получила название TORA (англ. Translational Oscillator with Rotational Actuator). Отметим, что помимо приложения к космическим аппаратам, TORA представляет и самостоятельный интерес. В частности, в работе [4] предложено использовать TORA в виде модели активного гашения вибраций вращением эксцентрикового маховика (см. также [5] и библиографию там). Закон управления, который обеспечит стабилизацию положения равновесия TORA, будет представлен в явном виде, то есть зависящим от физических характеристик модели (скорости, смещений, времени), что важно для его практической реализации.

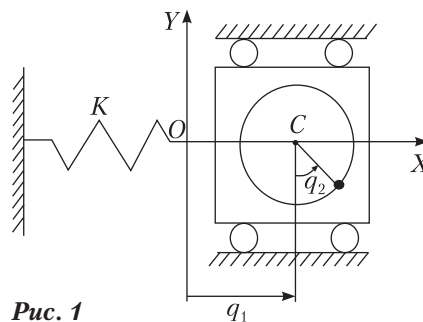


Рис. 1

© А.С. Хорошун, 2018

ISSN 1025-6415. Допов. Нац. акад. наук Укр. 2018. № 3

53

**Основной результат.** Описание устройства ММС TORA дано в работе [3]. На рис. 1 изображена схема TORA, где  $q_1$  — горизонтальное смещение центра маховика  $C$  от его положения равновесия  $O$ ,  $q_2$  — угол отклонения точечной массы от вертикали. Уравнения движения рассматриваемой модели имеют следующий вид:

$$\begin{cases} (M(p)+m(p))\ddot{q}_1+m(p)r(p)(\ddot{q}_2\cos(q_2)-\dot{q}_2^2\sin(q_2))+K(p)q_1=0, \\ (I(p)+m(p)r^2(p))\ddot{q}_2+m(p)r(p)\cos(q_2)\ddot{q}_1+m(p)gr(p)\sin(q_2)=\Delta, \end{cases} \quad (1)$$

где  $M(p)$  — масса тележки, мотора и маховика;  $m(p)$  — точечная масса;  $r(p)$  — расстояние между центром маховика и точечной массой;  $J(p)$  — момент инерции маховика;  $K(p)$  — жесткость пружины;  $\Delta$  — момент электромагнитных сил, приложенных к ротору электродвигателя со стороны статора;  $g$  — ускорение свободного падения;  $p \in P \subseteq R^n$  — векторный параметр, который описывает возможные неточности модели,  $n \in N$ . Задача состоит в том, чтобы выбрать закон управления  $\Delta$ , который стабилизирует положение равновесия  $q_1 = 0$ ,  $q_2 = 0$  TORA вне зависимости от начальных значений переменных.

Введя безразмерные переменные

$$\tilde{q}_1 = q_1 \sqrt{\frac{M(p)+m(p)}{I(p)+m(p)r^2(p)}}, \quad v = \frac{M(p)+m(p)}{K(p)(I(p)+m(p)r^2(p))} \Delta, \quad \tau = t \sqrt{\frac{K(p)}{M(p)+m(p)}}$$

и обозначив

$$\varepsilon(p) = \frac{m(p)r(p)}{\sqrt{(I(p)+m(p)r^2(p))(M(p)+m(p))}},$$

получим безразмерную систему дифференциальных уравнений, эквивалентную системе дифференциальных уравнений (1):

$$\begin{cases} \ddot{\tilde{q}}_1 + \tilde{q}_1 - \varepsilon(p)(\dot{q}_2^2 \sin(q_2) - \ddot{q}_2 \cos(q_2)) = 0, \\ \ddot{q}_2 + \varepsilon(p)\cos(q_2)\ddot{\tilde{q}}_1 + \frac{m(p)gr(p)(M(p)+m(p))}{K(p)(I(p)+m(p)r^2(p))} \sin(q_2) = v, \end{cases} \quad (2)$$

где дифференцирование ведется по обобщенному времени  $\tau$ . Пусть  $v = \alpha u + \beta$ , где

$$\alpha = 1 - \varepsilon^2(p)\cos^2(q_2),$$

$$\beta = \varepsilon^2(p)\dot{q}_2^2 \sin(q_2)\cos(q_2) - \varepsilon(p)\cos(q_2)\tilde{q}_1 + \frac{m(p)gr(p)(M(p)+m(p))}{K(p)(I(p)+m(p)r^2(p))} \sin(q_2),$$

тогда заменой переменных

$$\begin{cases} \eta_1 = \tilde{q}_1 + \varepsilon(p)\sin(q_2), \\ \eta_2 = \dot{\tilde{q}}_1 + \varepsilon(p)\dot{q}_2\cos(q_2), \\ \eta_3 = q_2, \\ \eta_4 = \dot{q}_2 \end{cases} \quad (3)$$

система дифференциальных уравнений (2) приводится к “каскадному” виду

$$\begin{cases} \dot{\eta}_1 = \eta_2, \\ \dot{\eta}_2 = -\eta_1 + \varepsilon(p)\sin(\eta_3), \\ \dot{\eta}_3 = \eta_4, \\ \dot{\eta}_4 = u, \end{cases} \quad (4)$$

из глобальной устойчивости состояния равновесия которой при управлении  $u$ , следует аналогичное свойство системы дифференциальных уравнений (2) при управлении  $v$ .

Применяя так называемый Dynamic Surface Control, см. [6], получим, что управление

$$u = -c_2 x_4 - \frac{y_2}{\tau_2},$$

где переменные  $(\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4)^T$  и  $(x_1, x_2, x_3, x_4, y_1, y_2)^T$  связаны соотношениями

$$\begin{cases} \eta_1 = x_1, \\ \eta_2 = x_2, \\ \eta_3 = x_3 + y_1 - \arctan\left(\frac{x_2}{\sqrt{1+x_1^2+x_2^2}}\right), \\ \eta_4 = x_4 + y_2 - c_1 x_3 - \frac{y_1}{\tau_1}, \end{cases} \quad (5)$$

стабилизирует состояние равновесия системы дифференциальных уравнений (4) вне зависимости от начальных значений переменных, если нулевое состояние равновесия системы дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2, \\ \dot{x}_2 = -x_1 + \varepsilon(p) \sin\left(x_3 + y_1 - \arctan\left(\frac{x_2}{\sqrt{G(x_1, x_2, p)}}\right)\right), \\ \dot{x}_3 = -c_1 x_3 + x_4 + y_2, \\ \dot{x}_4 = -c_2 x_4, \\ \dot{y}_1 = -\frac{y_1}{\tau_1} + F_1(x_1, x_2, x_3, y_1, p), \\ \dot{y}_2 = -\frac{y_2}{\tau_2} + F_2(x_1, x_2, x_3, y_1, y_2, p), \end{cases} \quad (6)$$

где

$$G(x_1, x_2, p) = 1 + x_1^2 + x_2^2, \quad F_1(x_1, x_2, x_3, y_1, p) = \frac{G(x_1, x_2, p)}{G(x_1, x_2, p) + x_2^2} \times$$

$$\times \left[ \frac{-x_1 + \varepsilon(p) \sin\left(x_3 + y_1 - \arctan\left(\frac{x_2}{\sqrt{G(x_1, x_2, p)}}\right)\right)}{\sqrt{G(x_1, x_2, p)}} - \right.$$

$$\left. - \frac{\varepsilon(p) x_2^2 \sin\left(x_3 + y_1 - \arctan\left(\frac{x_2}{\sqrt{G(x_1, x_2, p)}}\right)\right)}{(\sqrt{G(x_1, x_2, p)})^3} \right],$$

$$F_2(x, y, p) = c_1 x_4 + c_1 y_2 - c_1^2 x_3 - \frac{y_1}{\tau_1^2} + \frac{1}{\tau_1} F_1(x_1, x_2, x_3, y_1, p),$$

глобально асимптотически устойчиво. Такая устойчивость доказана. Указаны способы выбора параметров управления  $c_1, c_2, \tau_1, \tau_2$  и определения оценок области  $P$ , при всех значениях параметров из которой, данный тип устойчивости при выбранном управлении сохраняется.

Пусть  $c_1$  и  $\tau_1$  выбраны таким образом, что

$$c_1 = \frac{1}{\tau_1}.$$

Тогда из (3) и (5) следует

$$\begin{aligned} x_3 + y_1 &= \eta_3 + \arctan\left(\frac{\eta_1}{\sqrt{1 + \eta_1^2 + \eta_2^2}}\right) = \\ &= q_2 + \arctan\left(\frac{\dot{q}_1 + \varepsilon(p)\dot{q}_2 \cos(q_2)}{\sqrt{1 + (\tilde{q}_1 + \varepsilon(p)\sin(q_2))^2 + (\dot{q}_1 + \varepsilon(p)\dot{q}_2 \cos(q_2))^2}}\right), \\ x_4 + y_2 &= \eta_4 + c_1(x_3 + y_1) = \\ &= \dot{q}_2 + c_1\left(q_2 + \arctan\left(\frac{\dot{q}_1 + \varepsilon(p)\dot{q}_2 \cos(q_2)}{\sqrt{1 + (\tilde{q}_1 + \varepsilon(p)\sin(q_2))^2 + (\dot{q}_1 + \varepsilon(p)\dot{q}_2 \cos(q_2))^2}}\right)\right). \end{aligned}$$

Выразив величину  $x_4(\tau)$  из (6) в виде  $x_4(\tau) = x_4(0)\exp(-c_2\tau)$ , получим закон управления  $u$ , который явно зависит от физических характеристик исходной модели, в виде

$$\begin{aligned} u &= -c_2 x_4 - \frac{y_2}{\tau_2} = \left(-c_2 + \frac{1}{\tau_2}\right)x_4 - \frac{1}{\tau_2}(x_4 + y_2) = \left(-c_2 + \frac{1}{\tau_2}\right)x_4(0)\exp(-c_2\tau) - \frac{\dot{q}_2}{\tau_2} - \\ &- \frac{c_1}{\tau_2}\left(q_2 + \arctan\left(\frac{\dot{q}_1 + \varepsilon(p)\dot{q}_2 \cos(q_2)}{\sqrt{1 + (\tilde{q}_1 + \varepsilon(p)\sin(q_2))^2 + (\dot{q}_1 + \varepsilon(p)\dot{q}_2 \cos(q_2))^2}}\right)\right) \end{aligned}$$

или, переходя к размерным величинам, закон управления  $\Delta$  в виде

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{K(p)(I(p) + m(p)r^2(p))}{M(p) + m(p)} \times \\ &\times \left[ (1 - \varepsilon^2(p)\cos^2(q_2)) \left( \left(-c_2 + \frac{1}{\tau_2}\right)x_4(0)\exp\left(-c_2\sqrt{\frac{K(p)}{M(p) + m(p)}}t\right) - \frac{c_1}{\tau_2}q_2 - \right. \right. \\ &- \left. \sqrt{\frac{M(p) + m(p)}{K(p)}}\frac{\dot{q}_2}{\tau_2} - \frac{c_1}{\tau_2}\arctan(\Lambda(p, q_1, q_2, \dot{q}_1, \dot{q}_2)) \right) + \varepsilon(p)\frac{M(p) + m(p)}{K(p)}\sin(q_2)\cos(q_2)\dot{q}_2^2 - \\ &- \left. \varepsilon(p)\sqrt{\frac{M(p) + m(p)}{I(p) + m(p)r^2(p)}}\cos(q_2)q_1 + \frac{m(p)gr(p)(M(p) + m(p))\sin(q_2)}{K(p)(I(p) + m(p)r^2(p))} \right], \end{aligned} \quad (7)$$



где

$$\Lambda(p, q_1, q_2, \dot{q}_1, \dot{q}_2) = \frac{\Phi(p, q_2, \dot{q}_1, \dot{q}_2)}{\sqrt{1 + (\Phi(p, q_1, q_2))^2 + (\chi(p, q_2, \dot{q}_1, \dot{q}_2))^2}},$$

$$\Phi(p, q_2, \dot{q}_1, \dot{q}_2) = \frac{M(p) + m(p)}{\sqrt{K(p)(I(p) + m(p)r^2(p))}} \dot{q}_1 + \varepsilon(p) \sqrt{\frac{M(p) + m(p)}{K(p)}} \cos(q_2) \dot{q}_2,$$

$$\varphi(p, q_1, q_2) = \sqrt{\frac{M(p) + m(p)}{I(p) + m(p)r^2(p)}} q_1 + \varepsilon(p) \sin(q_2),$$

$$\chi(p, q_2, \dot{q}_1, \dot{q}_2) = \frac{M(p) + m(p)}{\sqrt{K(p)(I(p) + m(p)r^2(p))}} \dot{q}_1 + \varepsilon(p) \sqrt{\frac{M(p) + m(p)}{K(p)}} \cos(q_2) \dot{q}_2$$

и дифференцирование ведется по времени  $t$ .

Отметим, что варьируя величину  $x_4(0)$  получаем разные законы управления, из которых можно выбрать наиболее приемлемый. Кроме того, вид управления (7) можно упростить, если выбрать  $c_2$  и  $\tau_2$  таким образом, что

$$c_2 = \frac{1}{\tau_2}.$$

**Пример.** В качестве примера рассмотрим модель TORA с такими параметрами:  $M = 10$  кг,  $m = 1$  кг,  $K = 5$  Н/м,  $r = 1$  м,  $J = 1$  кг·м<sup>2</sup>. Параметры управления могут быть выбраны следующими:

$$c_1 = \frac{1}{\tau_1} = 25, \quad c_2 = \frac{1}{\tau_2} = 10^5.$$

Пусть начальное положение модели соответствует таким значениям переменных:  $q_1 = 1$ ,  $q_2 = 0$ ,  $\dot{q}_1 = 0$ ,  $\dot{q}_2 = 0$ . Убедимся, что управление  $\Delta$  решает поставленную задачу стабилизации. Поведение модели иллюстрирует рис. 2.

Таким образом, в работе получен явный вид управления вращением эксцентрикового маховика, которое обеспечивает стабилизацию положения равновесия TORA, вне зависимости от начальных значений переменных, описывающих поведение модели. Явный вид управления, то есть его зависимость от физических характеристик модели (скоростей, смещений, времени) является значимым для его практической реализации. Приемлемость полученного закона управления проиллюстрирована на примере реальной модели.

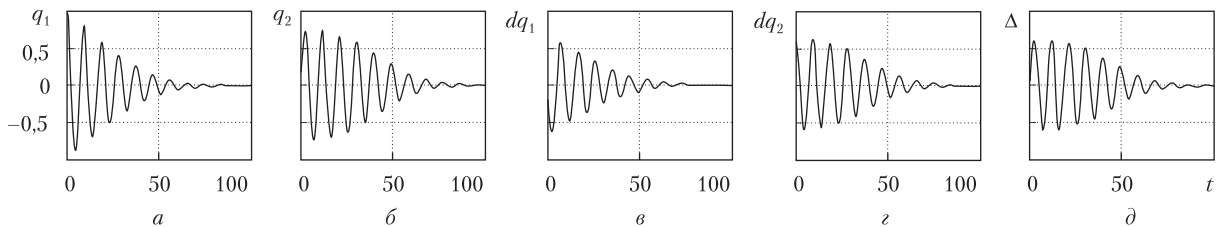


Рис. 2

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Liu Y., Yu H. A survey of underactuated mechanical systems. *IET Control Theory Appl.* 2013. 7, Iss. 7. P. 921–935. doi: <https://doi.org/10.1049/iet-cta.2012.0505>
2. Хорошун А.С. О стабилизации верхнего положения равновесия маятника вращением инерциального маховика. *Прикл. механика.* 2016. 52, № 5. С. 125–137.
3. Yee R. K. Spinup dynamics of a rotating system with limiting torque: Master's Thesis, Univ. California, Los Angeles, 1981.
4. Bupp R.T., Bernstein D.S., Coppola V.T. Vibration suppression of multi-modal translational motion using a rotational actuator. *Decision and Control: Proceedings of the 33rd IEEE Conference (Lake Buena Vista, 1994).* Lake Buena Vista, 1994, P. 4030–4034.
5. Zhang Y., Li L., Cheng B., Zhang X. An active mass damper using rotating actuator for structural vibration control. *Advances in Mech. Eng.* 2016. 8, Iss. 7. P. 1–9. doi: <https://doi.org/10.1177/1687814016657730>
6. Song B., Hedrick J.K. Dynamic surface control of uncertain nonlinear systems. An LMI approach. London: Springer, 2011. 268 p.

Поступило в редакцию 07.11.2017

REFERENCES

1. Liu, Y. & Yu, H. (2013). A survey of underactuated mechanical systems. *IET Control Theory Appl.*, 7, Iss. 7., pp. 921-935. doi: <https://doi.org/10.1049/iet-cta.2012.0505>
2. Khoroshun, A. S. (2016). Stabilization of the Upper Equilibrium Position of a Pendulum by Spinning an Inertial Flywheel. *Int. Appl. Mech.*, 52, Iss. 5. pp. 547-556. doi: <https://doi.org/10.1007/s10778-016-0775-1>
3. Yee, R. K. (1981) Spinup dynamics of a rotating system with limiting torque (unpublished master's thesis). Univ. California, Los Angeles, USA.
4. Bupp, R. T., Bernstein, D. S. & Coppola, V. T. (1994) Vibration suppression of multi-modal translational motion using a rotational actuator. *Proceedings of the 33rd IEEE Conference on Decision and Control*, (pp. 4030-4034), Lake Buena Vista.
5. Zhang, Y., Li, L., Cheng, B. & Zhang, X. An active mass damper using rotating actuator for structural vibration control. *Advances in Mech. Eng.*, 8, Iss. 7, pp. 1-9.
6. Song, B. & Hedrick, J. K. (2011). *Dynamic surface control of uncertain nonlinear systems. An LMI approach.* London: Springer.

Received 07.11.2017

А.С. Хорошун

Інститут механіки ім. С.П. Тимошенка НАН України, Київ  
E-mail: khoroshunanatoliy@gmail.com

ПРО ПОБУДОВУ КЕРУВАННЯ ПОСТУПАЛЬНИМ РУХОМ  
ОБЕРТАННЯМ ЕКСЦЕНТРИКОВОГО МАХОВИКА

Розглянуто приклад малоприводної механічної системи TORA. Отримано у явному вигляді закон керування обертанням ексцентрикового маховика, який забезпечує стабілізацію положення рівноваги TORA.

**Ключові слова:** малоприводна механічна система, глобальна асимптотична стійкість, ексцентриковий маховик, положення рівноваги.

A.S. Khoroshun

S.P. Timoshenko Institute of Mechanics of the NAS of Ukraine, Kiev  
E-mail: khoroshunanatoliy@gmail.com

ON THE CONSTRUCTION OF A CONTROL OVER THE TRANSLATIONAL MOTION  
BY THE ROTATION OF AN ECCENTRIC FLYWHEEL

The underactuated mechanical system TORA is investigated. The explicit form of a control law for the eccentric flywheel rotation, which ensures the stabilization of the equilibrium position of TORA, is obtained.

**Keywords:** underactuated mechanical system, global asymptotic stability, eccentric flywheel, equilibrium position.

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.03.059>

УДК 536.241

**Е.М. Руденко<sup>1</sup>, В.М. Сорокін<sup>2</sup>, І.В. Короташ<sup>1</sup>, Д.Ю. Полоцький<sup>1</sup>,  
А.О. Краковний<sup>1</sup>, О.Ю. Суворов<sup>1</sup>, М.О. Білоголовський<sup>1</sup>, Д.В. Пекур<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України, Київ

<sup>2</sup> Інститут фізики напівпровідників ім. В.Е. Лашкарьова НАН України, Київ

E-mail: emrudenko@ukr.net

## **Підвищення ефективності тепловідведення від потужних електронних пристроїв через термічні інтерфейси на основі плівок нітриду алюмінію**

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

*Досліджено ефективність використання плівок нітриду алюмінію в якості термічного інтерфейсу. Показано, що такі плівки, отримані в гібридному геліконно-дуговому іонно-плазмовому реакторі, значно поліпшують відвід тепла від кристалів електронних пристроїв, зокрема, від потужних світлодіодів або світлодіодних збірок і таким чином істотно підвищують стабільність їх світіння, надійність і довговічність.*

**Ключові слова:** термічні інтерфейси, тепловідведення, світлодіод, нітрид алюмінію.

Основний напрямок розвитку електронних та електротехнічних пристроїв полягає в зменшенні розмірів окремих елементів і збільшенні їх швидкодії. Однак при цьому неминує зростає теплова енергія, що виділяється в одиниці об'єму. Подальший прогрес в цій області вимагає більш ретельного контролю над тепловими процесами. При цьому тепловідвід стає одним з основних факторів, що обмежують подальшу мініатюризацію таких пристроїв [1].

Головна проблема тепловідведення в мікроелектроніці полягає в наявності теплового опору [2] на межі поділу двох різних середовищ, зокрема, між кристалом інтегральної схеми (чіпом) – джерелом тепловиділення – і підкладкою або корпусом, які служать стоком тепла. Вирішення проблеми стрибка температури на межі поділу двох середовищ можливе шляхом використання спеціальних матеріалів, які забезпечують так званий термічний інтерфейс (thermal interface material – ТІМ). Ідеальний ТІМ повинен мати дуже високу теплопровідність і при цьому ефективно заповнювати порожнечі між двома контактуючими поверхнями. Основною характеристикою ТІМ є тепловий опір інтерфейсу  $R_{\text{ТІМ}}$ , який характеризує ступінь поширення тепла через нього і пов'язує стрибок температури на межі поділу двох середовищ  $\Delta T$  з потоком тепла  $Q$  через неї  $\Delta T = R_{\text{ТІМ}}Q$ . При цьому величина  $R_{\text{ТІМ}}$  визначається тепловою неузгодженістю між ТІМ і двома контактуючими з ним середовищами, а також його власним тепловим опором, пропорційним товщині ТІМ шару і

© Е.М. Руденко, В.М. Сорокін, І.В. Короташ, Д.Ю. Полоцький, А.О. Краковний, О.Ю. Суворов,  
М.О. Білоголовський, Д.В. Пекур, 2018

обернено пропорційним коефіцієнту теплопровідності  $\lambda_{\text{ТІМ}}$ . Мінімізація значення  $R_{\text{ТІМ}}$  є основним фактором при виборі термічного інтерфейсу. Природно, що оптимальний ТІМ повинен мати якомога меншу товщину, максимально можливий коефіцієнт теплопровідності і дуже низькі значення теплового опору на границі ТІМ з двома середовищами, що його оточують. Крім цього, в більшості випадків ТІМ повинен бути ще і електричним ізолятором. Якщо коефіцієнти теплового розширення двох середовищ, що контактують з ТІМ, суттєво відрізняються один від одного, тоді ТІМ має стати свого роду проміжною ланкою, яка пом'якшує наслідки неузгодженості двох кристалічних ґраток. Принципи відбору оптимального матеріалу для термічного інтерфейсу обговорюються в роботі [3].

В даний час використовується кілька типів термічних інтерфейсів: термічні пасти (ідеально заповнюють порожнини між двома середовищами, але під дією зовнішніх напружень можуть витікати з контакту); полімерні матриці, які добре проводять тепло (такий наповнювач робить матеріал дуже жорстким, і тоді потрібно шукати компроміс між двома факторами — його м'якістю і кількістю); металеві припої, які забезпечують хороший контакт ТІМ із середовищами, але можуть розтріскуватися під дією механічної напруги, і, до того ж, є дорогими і складними в обробці, а також електропровідними, що в ряді випадків неприпустимо (див. огляд [4]). Кожен з наведених вище типів термічних інтерфейсів має свої переваги і недоліки. У зв'язку з відсутністю оптимальних рішень зберігається стимул для пошуку нових ТІМ з поліпшеними тепловими характеристиками, оптимальною надійністю і низькою ціною як для мікро- і наноелектроніки, так і для потужних електротехнічних пристроїв, зокрема, для відводу тепла від потужних напівпровідникових випромінюючих світло (LED) структур.

У даній роботі представлені результати дослідження використання в якості матеріалу термічного інтерфейсу плівок перспективного матеріалу — нітриду алюмінію, який поєднує в собі високу теплопровідність (понад  $170 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$  для квазімонокристалічних плівок) [5], відмінні ізоляційні властивості, механічну міцність і низький коефіцієнт теплового розширення [6]. Нижче наведені результати наших експериментальних досліджень характеристик потужних світлодіодів, що монтувались на алюмінієвій підкладці з товщиною 1,5 мм, покритій шаром (товщина 3–6 мкм) нітриду алюмінію. Отримані дані свідчать про перспективність використання даного матеріалу в якості ТІМ для підвищення ефективності відведення тепла і стабілізації робочої температури потужних електронних пристроїв. Для порівняння нами наведені аналогічні дослідження тих же світлодіодів на теплопровідних друкованих платах Т-101-Г, що складаються з алюмінієвої основи (товщиною 1,5 мм), діелектрика (поліамідної плівки товщиною 100 мкм) та мідної фольги (товщиною 35 мкм).

Незважаючи на те, що нітрид алюмінію є хорошим теплопровідним матеріалом, найбільшу теплопровідність при кімнатній температурі (близько  $320 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$ ) можуть проявляти тільки високоякісні монокристали AlN [7]. Теплопровідність плівок AlN залежить від технології отримання, товщини, наявності та щільності дефектів, вмісту кисню та якості кристалічної структури. Так для плівок AlN на кремнієвих підкладках, отриманих магнетронним напыленням в різних режимах, значення теплопровідності знаходилися в інтервалі від 0,8 до  $130 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$  [8]. Не менш важливим фактором для ефективного відводу тепла є узгодження кристалічної структури інтерфейсів AlN зі структурою навколишнього середовища. Подальший прогрес в цій області вимагає вибору технології, ретельного під-

бору основних технологічних параметрів виготовлення та аналізу мікроструктури плівок нітриду алюмінію.

Для створення нових високоефективних ТІМ на основі плівок нітриду алюмінію нами була розроблена оригінальна методика отримання високоякісних наноструктурованих плівок нітриду алюмінію на алюмінієвих підкладках, яка полягає в тому, що всі технологічні операції проводяться в єдиному іонно-плазмовому вакуумно-технологічному циклі без розриву вакууму (*in situ*) з використанням низькотемпературної плазми високої щільності. Для реалізації таких вакуумно-технологічних процесів застосовували унікальний гібридний геліконно-дуговий іонно-плазмовий реактор, що складається з геліконного і плазмодугових джерел [9–11].

Процес створення нового ТІМ на основі плівок нітриду алюмінію на алюмінієвій підкладці складався з наступних двох основних етапів.

1. *Підготовка алюмінієвої підкладки*: підкладку розміщували в робочій камері гібридного іонно-плазмового реактора; проводили відкачку робочої камери до отримання вакууму порядку  $1,33 \cdot 10^{-2}$  Па; напускали робочий газ аргон до тиску в робочій камері порядку 1,33 Па, включали геліконне джерело плазми для проведення спочатку очищення внутрішньої поверхні робочої камери від залишків атмосферних газів і різних забруднень (режим “Розряд зверху” і в подальшому проведення очищення підкладки від окисної плівки при збільшенні густини плазми і інтенсивності бомбардування іонами аргону поверхні підкладки (режим “Колона”) [10].

Оптимальний час роботи геліконного джерела для ефективного очищення поверхні алюмінієвих підкладок складав близько 10 хв.

2. *Формування плівки нітриду алюмінію на атомарно чистій поверхні алюмінієвої підкладки*: включали плазмодуговий прискорювач (ПДУ), який забезпечував масоперенос матеріалу витратного (алюмінієвого) катода в реакторну камеру, заповнену робочим газом (азот при тиску порядку 1,33 Па), і формування на поверхні алюмінієвої підкладки необхідного шару нітриду алюмінію.

Значення робочих тисків геліконного іонно-плазмового джерела і ПДУ збігалися і становили від 13,3 до 0,133 Па. Це дозволяло двом джерелам плазми спільно здійснювати перенесення іонної складової з додатковою іонізацією області поблизу оброблюваної поверхні алюмінієвої підкладки. При нанесенні плівки нітриду алюмінію на поверхню алюмінієвої підкладки геліконне джерело переводили в режим “Розряд вгору”, а ПДУ працював у режимі “З поворотом дуги” іонного потоку [9, 10]. Завдяки повороту високоенергетичний потік плазми з ПДУ очищався від мікрокраплинної (електронейтральної) фази алюмінію, що забезпечувало отримання якісних плівок нітриду алюмінію. Оскільки поворот дуги здійснювали подачею постійного струму на керуючу котушку, то при включенні повороту дуги геліконне іонно-плазмове джерело переходило з режиму “Розряд вгору” в режим “Колона” зі слабкою концентрацією іонно-плазмової компоненти. Це забезпечувало додаткову іонізацію падаючого потоку і значно зменшувало частку вільних атомів алюмінію та азоту, що не прореагували. Для отримання високоякісної плівки нітриду алюмінію завтовшки 4–5 мкм необхідний час експозиції становив близько п'яти хвилин.

Відомо, що довговічність, ефективність і параметри напівпровідникових інтегральних схем і LED-структур істотно залежать від температури робочої області напівпровідниково-

го кристала і її стабільності в процесі експлуатації. Для визначення ефективності відведення тепла різними ТІМ від робочої зони напівпровідникового кристала необхідно визначити стабільність його робочої температури в процесі експлуатації. Проте безпосередньо виміряти цю температуру в процесі експлуатації для складного багатокомпонентного виробу, до того ж в корпусі, з технічної сторони є дуже складною і трудомісткою задачею. Тому нами була розроблена ефективна експрес-методика визначення температурної стабільності і температурного контролю робочої точки напівпровідникових пристроїв (зокрема, LED-структур), яка полягає в вимірюванні вольт-амперних характеристик (ВАХ) в процесі роботи і порівняння їх з еталонним сімейством ВАХ цього ж пристрою, отриманих при різних температурах кристала. При цьому необхідно було забезпечити відсутність розігріву кристала безпосередньо струмом.

Для визначення ефективності застосування в якості ТІМ плівок нітриду алюмінію, отриманих нами в гібридному геліконно-дуговому іонно-плазмовому реакторі, були виготовлені і досліджені два типи систем відбору тепла від LED-структур, що відрізняються тільки використанням різних ТІМ. У першому типі застосовували стандартний метод охолодження світлодіода, оснований на використанні теплопровідної друкованої плати Т-101-Г, що складається з алюмінієвої основи, діелектрика та мідної фольги. У другому типі в якості ТІМ були використані плівки нітриду алюмінію, нанесені на алюмінієву підкладку. При цьому тестували надяскраві білі світлодіоди LED 3W White 280 Lm BIN1 (виробник Epistar).

#### Технічні характеристики світлодіодів

Розміри (діаметр × висота), мм	16 × 5
Робоча напруга, В	3,4–3,6
Номинальний струм, мА	700
Потужність, що розсіюється, Вт	3
Кут світіння, град	120
Світловий потік, Лм	260–280
Корельована колірна температура, К	6000–6500
Підвищена робоча температура середовища, °С	не більша 80
Знижена робоча температура середовища, °С	не нижча –40 °С

Для першого типу системи відбору тепла світлодіод з'єднували з мідною поверхнею теплопровідної друкованої плати Т-101-Г за допомогою термопровідної пасти КПТ-19. Для другого типу системи світлодіоди за допомогою термопровідного клею Sealant Silicone RTV-904 монтували на сформовану нами плівку нітриду алюмінію, нанесену на алюмінієву пластину, з якої попередньо були видалені мідна фольга і шар поліаміду.

ВАХ світлодіодів, змонтованих на першому і другому типі систем відбору тепла, вимірювали стандартним чотиризондовим методом [12].

Розглянемо докладніше мезоскопічний контакт алюмінію з нітридом алюмінію і оцінімо тепловий потік, що проходить через нього. При цьому скористаємося аналогією з добре розробленою мікроскопічною теорією зарядового транспорту через гетероконтакти, замінюючи електрони на фонони і статистику Фермі–Дірака на статистику Бозе–Ейнштейна  $n_i = [\exp(\epsilon_i - \mu) / (k_B T) - 1]^{-1}$ , де  $\epsilon_i$  – енергія фонона;  $\mu$  – хімічний потенціал;  $k_B$  – постійна Больцмана [13].

Тепловий потік з шару  $i$  в шар  $j$  ( $i, j = 1, 2$ ) описується формулою

$$q_{ij} = \frac{1}{4\pi} \sum_{\omega, p} \langle \hbar \omega v_i F_i(\omega, p) \alpha_{ij} \cos \theta \rangle n_i, \quad (1)$$

де  $\omega$  — частота фонона;  $p$  — його поляризація;  $v_i$  — групова швидкість, яка залежить від  $\omega$  і  $p$ ;  $F_i(\omega, p)$  — густина фононних станів;  $\alpha_{ij}$  — ймовірність проходження фонона через інтерфейс між  $i$  та  $j$  шарами;  $\theta$  — кут між імпульсом фонона і нормаллю до поверхні розділу двох шарів,  $\langle \dots \rangle$  означає інтегрування по півсфері. Винесемо  $\alpha_{ij}$  за межі підсумовування і інтегрування, замінивши цю величину середнім значенням  $\tilde{\alpha}_{ij}$ . Тоді отримаємо, що потік тепла  $q_{ij}$  пропорційний опроміненню  $E_i$  — густині потоку енергії випромінювання, що падає на поверхню розділу з боку  $i$ -го шару:

$$q_{ij} = \tilde{\alpha}_{ij} E_i. \quad (2)$$

Зі співвідношення (1) випливає, що для контактів діелектрик—діелектрик і метал—діелектрик, в яких тепло переноситься тільки фононами, тепловий потік  $q_{ij}$  визначається декількома факторами, а саме, робочою температурою, спектром коливань кристалічної ґратки і якістю інтерфейсу. Остання характеристика значною мірою залежить від умов виготовлення досліджуваних гетероструктур, проте навіть в ідеальному контакті двох різних пружних середовищ параметр  $\alpha_{12} < 1$  через те, що їх пружні властивості, зокрема, швидкості звуку  $c_1(\theta)$  і  $c_2(\theta)$ , а також густини  $\rho_1$  і  $\rho_2$  відрізняються один від одного. Якщо дотримуватися дебаєвського наближення довгохвильових фононів, тоді [14]

$$\alpha_{12}(\theta) = \frac{4\rho_1\rho_2c_1(\theta_1)c_2(\theta_2)\cos\theta_1\cos\theta_2}{(\rho_1c_1(\theta_1)\cos\theta_2 + \rho_2c_2(\theta_2)\cos\theta_1)^2}. \quad (3)$$

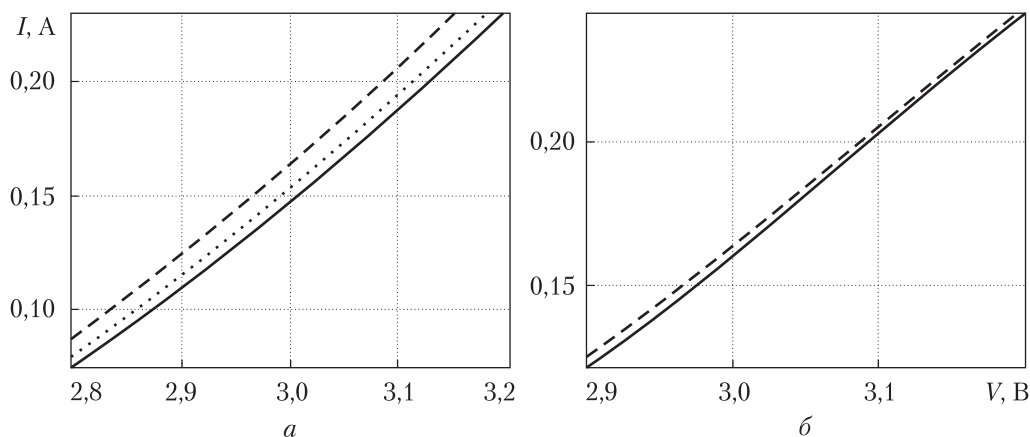
Тут кути  $\theta_1$  і  $\theta_2$  пов'язані співвідношенням, яке аналогічне закону заломлення в оптиці  $\sin\theta_1 / \sin\theta_2 = c_2(\theta_2) / c_1(\theta_1)$ , індекс  $p$  ми опускаємо.

Співвідношення (3) було отримано в рамках ідеалізованого уявлення про впорядковану кристалічну структуру двох плівок поблизу плоского інтерфейсу. При розсіюванні на шорсткій границі поперечна компонента імпульсу фонона і його поляризація не зберігаються, а виконується лише умова  $\omega = \text{const}$ . На відміну від рівняння (3) в дифузійному наближенні вираз для  $\alpha_{12}$  стає несиметричним по відношенню до заміни індексів  $1 \rightarrow 2$  і в рамках моделі Дебая має вигляд [15]

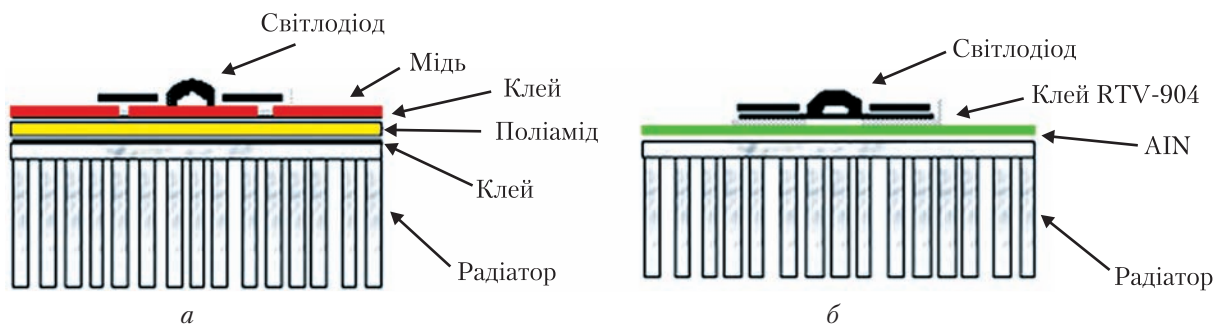
$$\alpha_{12} = \frac{c_1^2}{c_1^2 + c_2^2}. \quad (4)$$

Використовуючи дані [8] для усереднених швидкостей звуку в двох контактуючих матеріалах — нітриді алюмінію  $c_1 = 7,0 \cdot 10^5$  см/с і алюмінію  $c_2 = 5,2 \cdot 10^5$  см/с, ми отримуємо, що на інтерфейсі AlN/Al  $\alpha_{12} \approx 0,64$ . Це означає, що велика частина тепла в наших зразках, дійсно, переходить з нітриду алюмінію в алюміній.

Як і слід було очікувати, при нагріванні LED-структур їхні ВАХ помітно змінювалися через зниження опору кристала світлодіода. На першому етапі були отримані еталонні сімейства ВАХ для кожного з досліджуваних типів систем відбору тепла від LED-структур, виміряні при температурах кристала світлодіодів  $T$  від 40 °С до 120 °С. Для цього зразки по-



**Рис. 1.** Вольт-амперні характеристики світлодіода LED 3W White 280 Lm BIN1 на алюмінієвій пластині з промисловим ТІМ, друкована плата Т-101-Г (а) і з ТІМ плівкою нітриду алюмінію (б). Суцільні криві — результати вимірів без нагріву при температурі 13 °С; пунктирна крива — ефект нагріву струмом навантаження 300 мА, що відповідає температурі 25 °С на рис. 1, а; штрихові криві — ефект нагріву струмом навантаження 550 мА, що відповідає температурі 54 °С на рис. 1, а і лише 23 °С на рис. 1, б



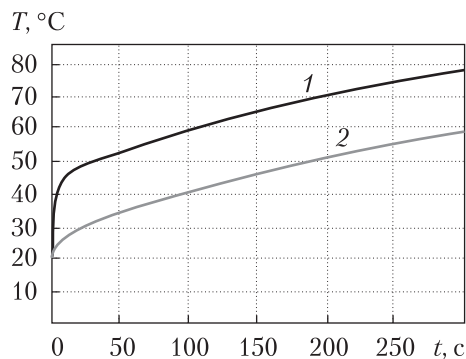
**Рис. 2.** Конструкції тепловідведення від світлодіода для класичної схеми відведення тепла (а) і схеми з використанням термічного інтерфейсу на основі плівки нітриду алюмінію (б)

міщали в термошафу, що забезпечувало нагрів і стабілізацію температури пристроїв в процесі досліджень, і проводили вимірювання ВАХ при фіксованих температурах. При цьому світлодіод, підключений до вимірювальної системи, нагрівали до певної температури без подачі на нього напруги. Потім ВАХ записували протягом менш ніж однієї секунди. Для цього використовували джерело струму з тривалістю розгортки струму 0,5 с. За цей час кристал світлодіода не встигав помітно нагрітися вимірювальним струмом, про що свідчила практична відсутність на ВАХ гістерезису при зміні напрямку розгортки. Температура зразка змінювалась із кроком в десять градусів і при кожній температурі записувалась відповідна ВАХ.

Для визначення ефективності тепловідведення відповідним ТІМ кристал світлодіода нагрівали навантажувальним струмом під час світіння. Для цього через світлодіод пропускали струми величиною 300 і 550 мА протягом 20 с, які розігрівали його. Відразу після відключення навантажувального струму на зразок подавався імпульс вимірювального струму три-



**Рис. 3.** Динаміка зміни температури кристала світлодіода потужністю 3 Вт в часі для двох конструкцій систем тепловідводу, представлених на рис. 2: 1 – поліамід; 2 – нітрид алюмінію



валістю 0,5 с і проводили запис ВАХ. Отримані таким чином ВАХ випромінюючої світло LED-структури порівнювали з температурно-каліброваним еталонним сімейством її ВАХ. Таким чином, в кожному конкретному експерименті можна було визначити величину зміни температури кристала світлодіода під час його роботи, що дозволяло порівняти ефективність застосовуваних ТІМ, оскільки всі інші елементи систем відбору тепла від LED-структур були однаковими.

Типові ВАХ зазначених LED-структур з двома типами ТІМ представлені на рис. 1. Для випромінюючих структур зі світлодіодами LED 3W White 280 Lm BIN1 на алюмінієвій пластині і промислового ТІМ (шар поліаміду з мідними електродами) на рис. 1, а наведені еталонна ВАХ (суцільна крива) при температурі 13 °С (без подачі струму навантаження і без світіння світлодіода) і ВАХ при струмах навантаження 300 мА (пунктирна крива) і 550 мА (штрихова крива) і при світінні світлодіода. Для випромінюючих структур зі світлодіодами LED 3W White 280 Lm BIN1 на алюмінієвій пластині і запропонованому нами ТІМ з нітриду алюмінію (товщина 5 мкм) на рис. 1, б наведена еталонна ВАХ (суцільна крива) при кімнатній температурі 13 °С (без подачі струму навантаження і без світіння світлодіода) і ВАХ (штрихова крива) при струмі навантаження 550 мА і при світінні світлодіода. ВАХ при струмі навантаження 300 мА на рис. 1, б не відображено.

Порівнюючи еталонну ВАХ і ВАХ при струмі навантаження 550 мА для двох типів ТІМ (див. рис. 1) можна зробити висновок, що температура світлодіода, встановленого на алюмінієвій пластині з використанням промислового ТІМ – друкована плата Т-101-Г, значно підвищується під впливом струму навантаження  $I_n$  при тривалості роботи 20 с. При цьому на рис. 1, а крива для  $I_n = 300$  мА відповідає температурі 25 °С, а для  $I_n = 550$  мА – 54 °С. У той же час саме такий струм практично не впливав на температуру світлодіода, встановленого на ТІМ з нітриду алюмінію, оскільки на рис. 1, б крива для  $I_n = 550$  мА відповідає температурі лише 23 °С (температури визначали на основі описаного вище методу вимірювання ВАХ при фіксованих температурах).

Для підтвердження ефективності ТІМ на основі плівок нітриду алюмінію для відведення тепла від потужних світлодіодів було проведено моделювання динаміки зміни в часі температури кристала світлодіода потужністю 3 Вт для двох конструкцій систем тепловідводу, представлених на рис. 2. Стандартна система (рис. 2, а) складалася з радіатора з приєднаної до нього за допомогою термопасти алюмінієвої пластини із шаром ізолюючого матеріалу (поліаміда) і мідної фольги зі сформованими електродами для пайки світлодіода і його контактів. Друга система (рис. 2, б) представляла собою той же радіатор, на плоску поверхню якого нанесено шар нітриду алюмінію.

При моделюванні використовували модуль Flow Simulation програмного комплексу САПР Solidworks. Вхідними даними для моделювання були геометричні розміри, які відпо-

відали експериментальним зразкам, а також довідкові параметри використовуваних матеріалів. Результати моделювання представлені на рис. 3.

Дані порівняльних досліджень світлодіодів, розміщених на алюмінієвій підкладці, свідчать про поліпшення теплопередачі між двома контактуючими середовищами і про ефективне відведення тепла від світловипромінювальних діодів при використанні плівок AlN в якості ТІМ в порівнянні з тими, що застосовуються зараз у промисловості.

Таким чином, плівки нітриду алюмінію, отримані в гібридному геліконно-дуговому іонно-плазмовому реакторі, можуть ефективно застосовуватись для поліпшення відводу тепла від кристалів електронних пристроїв, зокрема, від потужних світлодіодів або світлодіодних збірок, що значно підвищить стабільність їх світіння, надійність і довговічність.

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Moore, A. L., Shi L. Emerging challenges and materials for thermal management of electronics. *Mater. Today*. 2014. **17**. № 4. P. 163–174. doi: <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2014.04.003>
2. Pollack G. L. Kapitza resistance. *Rev. Modern Phys.* 1969. **41**, № 1. P. 48–81. doi: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.41.48>
3. Due J., Robinson A. J. Reliability of thermal interface materials: a review. *Appl. Thermal Eng.* 2013. **50**, № 1. P. 455–463. doi: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2012.06.013>
4. Prasher R. Thermal interface materials: historical perspective, status, and future directions. *Proc. IEEE*. 2006. **94**, № 8. P. 1571–1586. doi: <https://doi.org/10.1109/JPROC.2006.879796>
5. Bogner M., Benstetter G., Fu Y. Q. Cross- and in-plane thermal conductivity of AlN thin films measured using differential 3-omega method. *Surf. Coat. Technol.* 2017. **320**. P. 91–96. doi: <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2017.01.100>
6. Часнык В. И. Применение высокотеплопроводной керамики из нитрида алюминия в вакуумных электронных приборах СВЧ. *Технология и конструирование в электронной аппаратуре*. 2013. № 4. С. 8–12.
7. Slack G. A. Nonmetallic crystals with high thermal conductivity. *J. Phys. Chem. Solids*. 1973. **34**. № 2. P. 321–335. doi: [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(73\)90092-9](https://doi.org/10.1016/0022-3697(73)90092-9)
8. Pan T. S., Zhang Y., Huang J., Zeng B., Hong D. H., Wang S. L., Zeng H. Z., Gao M., Huang W., Lin Y. Enhanced thermal conductivity of polycrystalline aluminum nitride thin films by optimizing the interface structure. *J. Appl. Phys.* 2012. **112**, № 4. P. 044905–1–044905-5. doi: <https://doi.org/10.1063/1.4748048>
9. Семенюк В.Ф., Руденко Э.М., Коротаєв І.В., Осипов Л.С., Полоцький Д.Ю., Шамрай К.П., Одиноків В.В., Павлов Г.Я., Сологуб В.А. Унифіцированное технологическое ионно-плазменное оборудование формирования наноструктур. *Металлофизика и новейшие технологии*. 2011. **33**, № 2. С. 223–231.
10. Осипов Л., Руденко Э., Семенюк В., Коротаєв І., Одиноків В., Павлов Г., Сологуб В. Высокоэффективный источник низкотемпературного нанесения пленок и покрытий. *Наноиндустрия*. 2010. № 2. С. 4–6.
11. Плазмовий пристрій нанесення багаточарових плівкових покриттів: пат. 87747 Україна. МПК С23С 14/34 (2006.01). Заявл. 17.12.2010. Опубл. 25.02.2014.
12. Воробьев Ю.В., Добровольский В.Н., Стриха В.И. Методы исследования полупроводников. Киев: Вища школа, 1988. 232 с.
13. Chen G. Nanoscale energy transport and conversion: a parallel treatment of electrons, molecules, phonons, and photons. Oxford, UK: Oxford Univ. Press. 2005. 531 с.
14. Little W. A. The transport of heat between dissimilar solids at low temperatures. *Can. J. Phys.* 1959. **37**, № 3. P. 334–349. doi: <https://doi.org/10.1139/p59-037>
15. Swartz E. T., Pohl R. O. Thermal boundary resistance. *Rev. Mod. Phys.* 1989. **61**, № 3. P. 605–668. doi: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.61.605>

Надійшло до редакції 13.11.2017

REFERENCES

1. Moore, A. L. & Shi, L. (2014). Emerging challenges and materials for thermal management of electronics. *Mater. Today*, 17, No. 4, pp. 163-174. doi: <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2014.04.003>
2. Pollack, G. L. (1969). Kapitza resistance. *Rev. Modern Phys.* 41, No. 1, pp. 48-81. doi: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.41.48>
3. Due, J. & Robinson, A. J. (2013). Reliability of thermal interface materials: a review. *Appl. Thermal Eng.* 50, No. 1, pp. 455-463. doi: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2012.06.013>
4. Prasher, R. (2006) Thermal interface materials: historical perspective, status, and future directions. *Proc. IEEE*, 94, No. 8, pp. 1571-1586. doi: <https://doi.org/10.1109/JPROC.2006.879796>
5. Bogner, M., Benstetter, G. & Fu, Y. Q. (2017). Cross- and in-plane thermal conductivity of AlN thin films measured using differential 3-omega method. *Surf. Coat. Technol.* 320, pp. 91-96. doi: <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2017.01.100>
6. Chasnyk, V. I. (2013). Application of high-conductivity aluminum nitride ceramics in vacuum electronic microwave devices. *Techn. Design. Electron. Equipment*. No. 4, pp. 8-12 (in Russian).
7. Slack, G. A. (1973). Nonmetallic crystals with high thermal conductivity. *J. Phys. Chem. Solids*. 34, No. 2, pp. 321-335. doi: [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(73\)90092-9](https://doi.org/10.1016/0022-3697(73)90092-9)
8. Pan, T. S., Zhang, Y., Huang, J., Zeng, B., Hong, D. H., Wang, S. J., Zeng, H. Z., Gao, M., Huang, W. & Lin, Y. (2012). Enhanced thermal conductivity of polycrystalline aluminum nitride thin films by optimizing the interface structure. *J. Appl. Phys.* 112, No. 4, pp. 044905-1-044905-5. doi: <https://doi.org/10.1063/1.4748048>
9. Semeniuk, V. F., Rudenko, E. M., Korotash, I. V., Osipov, L. S., Polotsky, D. Yu., Shamray, V. V., Odinson, V. V., Pavlov, G. Ya. & Sologub, V. A. (2011). Unified technological ion-plasma equipment for the formation of nanostructures. *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.* 33, No. 2, pp. 223-231 (in Russian).
10. Osipov, L., Rudenko, E., Semeniuk, V., Korotash, I., Odinson, V., Pavlov, G. & Sologub, V. (2010). Highly effective source of the low-temperature deposition of films and coatings. *Nanoindustr.* № 2, pp. 4-6 (in Russian).
11. Pat. 87747 UA, IPC C23C 14/34 (2006.01), Plasma device for application of multilayered film coatings, Veremejchenko, G. N., Korotash, I. V., Rudenko, E. M., Semeniuk, V. F., Odinson, V. V., Pavlov, H. Y. & Sologub, V. A. Publ. 25.02.2014 (in Ukrainian).
12. Vorobyov, Yu. V., Dobrovolskii, V. N. & Strikha, V. I. (1988). *Methods for studying semiconductors*. Kyiv: Vyscha Shkola.
13. Chen, G. (2005). *Nanoscale energy transport and conversion: a parallel treatment of electrons, molecules, phonons, and photons*. Oxford: Oxford Univ. Press.
14. Little, W.A. (1959). The transport of heat between dissimilar solids at low temperatures. *Can. J. Phys.* 37, No. 3, pp. 334-349. doi: <https://doi.org/10.1139/p59-037>
15. Swartz, E. T. & Pohl, T. O. (1989). Thermal boundary resistance. *Rev. Mod. Phys.* 61, No. 3, pp. 605-668. doi: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.61.605>

Received 13.11.2017

Э.М. Руденко <sup>1</sup>, В.М. Сорокин <sup>2</sup>, И.В. Короташ <sup>1</sup>, Д.Ю. Полоцкий <sup>1</sup>,  
А.А. Краковный <sup>1</sup>, А.Ю. Суворов <sup>1</sup>, М.А. Белоголовский <sup>1</sup>, Д.В. Пекур <sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины, Киев

<sup>2</sup> Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева НАН Украины, Киев

E-mail: emrudenko@ukr.net

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ТЕПЛОТВОДА ОТ МОЩНЫХ  
ЭЛЕКТРОННЫХ УСТРОЙСТВ ЧЕРЕЗ ТЕРМИЧЕСКИЕ ИНТЕРФЕЙСЫ  
НА ОСНОВЕ ПЛЕНОК НИТРИДА АЛЮМИНИЯ

Исследована эффективность использования пленок нитрида алюминия в качестве термического интерфейса. Показано, что такие пленки, полученные в гибридном геликонно-дуговом ионно-плазменном реакторе, значительно улучшают отвод тепла от кристаллов электронных устройств, в частности, от мощных светодиодов или светодиодных сборок и таким образом существенно повышают стабильность их свечения, надежность и долговечность.

**Ключевые слова:** термические интерфейсы, теплоотвод, светодиод, нитрид алюминия.

*E.M. Rudenko*<sup>1</sup>, *V. M. Sorokin*<sup>2</sup>, *I.V. Korotash*<sup>1</sup>, *D.Yu. Polotsky*<sup>1</sup>,  
*A.O. Krakovny*<sup>1</sup>, *O.Yu. Suvorov*<sup>1</sup>, *M.O. Belogolovskii*<sup>1</sup>, *D.V. Pekur*<sup>2</sup>

<sup>1</sup> G.V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the NAS of Ukraine, Kiev

<sup>2</sup> V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of the NAS of Ukraine, Kiev

E-mail: emrudenko@ukr.net

ENHANCEMENT OF THE EFFICIENCY OF HEAT REMOVAL  
FROM POWERFUL ELECTRONIC DEVICES THROUGH THERMAL  
INTERFACES BASED ON ALUMINUM NITRIDE FILMS

The efficiency of aluminum nitride films as thermal interfaces has been studied. It is shown that such films obtained in a hybrid helicon-arc ion-plasma reactor significantly improve the heat removal from the crystals of electronic devices, in particular, from powerful LEDs or LED assemblies, and thus noteworthy increase their luminosity, reliability, and durability.

**Keywords:** *thermal interfaces, heat sink, LED, aluminum nitride.*

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.03.069>

УДК 669.162.23

**Б.И. Басок, В.В. Гоцуленко**

Институт технической теплофизики НАН Украины, Киев

E-mail: gosul@ukr.net

## **Механизмы теплогидродинамической неустойчивости при локальном подводе теплоты к газу**

*Представлено членом-корреспондентом НАН Украины Б.И. Баском*

*Получена математическая модель нестационарных движений газа при локальном подводе к нему теплоты вдоль некоторой поверхности. В уравнениях движения для рассмотренной задачи конкретизирован тензор диссипации тепловой энергии, ассоциированный с поверхностью теплоподвода и характеризующий наличие отрицательного теплового сопротивления. Получено уравнение на компоненты данного тензора и рассмотрены некоторые его частные случаи.*

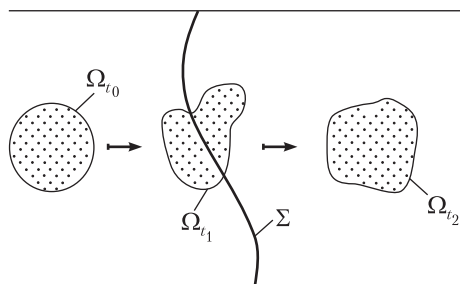
**Ключевые слова:** тензор диссипации тепловой энергии, "отрицательное" тепловое сопротивление, неустойчивость, термоакустические автоколебания.

В распределенных системах гидродинамического типа ламинарно-турбулентный переход, в частности возбуждение автоколебаний, исследуется с ростом числа Рейнольдса, как правило, обусловленным увеличением средней скорости потока. В данных исследованиях одним из основных инструментов является привлечение различных бифуркационных теорем, например теоремы Андронова—Хопфа о бифуркации рождения цикла. Отметим, что рост числа Рейнольдса может быть обусловлен и падением вязкости, что имеет место при определенных движениях многофазных сред, структурированных и стратифицированных жидкостей [1], а также при подводе теплоты к жидкости или теплоотводе от нее. В жидкостях с сильной зависимостью вязкости от температуры при достаточных градиентах давления возникает явление саморазогрева, также приводящее к падению вязкости. Дестабилизирующая роль вязкости является следствием закона запаздывания в передаче действия в вязкой среде, а это запаздывание может изменить знак эффективного трения, т. е. вызвать неустойчивость. В [2] рассматривается образование отрицательного сопротивления и автоколебаний в потоке жидкости с экспоненциальной зависимостью ее вязкости от температуры, причиной которых является ее саморазогрев. В [3] на основании результатов большого количества экспериментальных исследований феномена Рийке утверждается, что классическая модель волновых процессов не может объяснить причины самовозбуждения автоколебаний. В [4] был обоснован механизм образования отрицательного сопротивления на

© Б.И. Басок, В.В. Гоцуленко, 2018

ISSN 1025-6415. Допов. Нац. акад. наук Укр. 2018. № 3

69



Схематическое изображение выделения в потоке среды "жидкого объема"  $\Omega_t$

зависимости гидравлических потерь по длине трубы Рийке при постоянном тепловом потоке. Применение этого механизма позволило теоретически определить закономерности феномена Рийке [5]. Теоретическое описание феномена Рийке, в основу которого положены механизмы отрицательных сопротивлений, качественно и количественно подтверждается результатами экспериментов [3].

По-видимому, в [6] впервые было установлено, что процесс подвода тепла вносит в поток газа особый вид сопротивления: при подогреве движущегося газа

полное давление падает. Обнаруженное сопротивление было названо Г.Н. Абрамовичем "тепловым" и в [6] приведено его термодинамическое истолкование.

В [7] Б.В. Раушенбах получил выражение для теплового сопротивления при нагреве идеальной (невязкой) несжимаемой жидкости и привел его обоснование как механизма возбуждения вибрационного горения. С помощью этого соотношения для теплового сопротивления Б.В. Раушенбах пытался представить качественную картину возбуждения акустических колебаний теплоподводом за счет кинетической энергии течения. Было высказано предположение, что если теплоподвод будет колебаться около нуля, то на поток будет попеременно действовать то положительное, то отрицательное сопротивление. Если при этом увеличению скорости течения будет соответствовать уменьшение сопротивления, то система будет раскачиваться [7].

Согласно общим представлениям механики [8] эффект "отрицательного" сопротивления или "отрицательного" трения состоит в реализации условий, когда с увеличением скорости движения механической системы ее энергия не уменьшается (например, за счет сил вязкого трения, пропорциональных скорости), а, наоборот, увеличивается. Физика такого явления в различных системах своя. Однако благодаря данному явлению установившееся движение (или положение равновесия механической системы) становится неустойчивым и в системе возможно самовозбуждение автоколебаний.

Таким образом, "отрицательное" тепловое сопротивление — это формальный термин, означающий, что при выполнении определенных условий, местное гидравлическое сопротивление зоны теплоподвода не возрастает с увеличением скорости движения теплоносителя, а, наоборот, уменьшается, что приводит к возникновению гидродинамической неустойчивости и возбуждению автоколебаний. В [9] найдено аналитическое выражение для теплового сопротивления, возникающего при политропном подводе теплоты к движущемуся совершенному невязкому газу.

В данной работе на основе фундаментальных законов сохранения механики сплошной среды и базовых уравнений термодинамики решается задача получения уравнения для тензора диссипации тепловой энергии, возникающего при локальном теплоподводе к трехмерному потоку газа. В частном случае одномерного потока данный тензор вырождается в рассмотренное ранее тепловое сопротивление.

**Вывод уравнений движения при теплоподводе.** Рассмотрим движение вязкой теплопроводящей сжимаемой жидкости (рисунок) с локальным теплоподводом, распределенным

вдоль некоторой поверхности  $\Sigma$ . Выделим в потоке движущейся среды в начальный момент времени  $t_0$  малую область  $\Omega_{t_0}$ , составленную из частиц среды. Тогда в момент времени  $t > t_0$  данная область (см. рисунок) деформируясь перейдет в некоторую область  $\Omega_t$ .

Непосредственным вычислением можно проверить справедливость следующего интегрального равенства:

$$\iiint_{\Omega_t} a(\vec{r}, t) d\omega = \iiint_{\Omega_t} \frac{\partial a}{\partial t} d\omega + \iint_{\partial\Omega_t} a(\vec{r}, t) (\vec{V} \cdot \vec{n}) ds, \quad (1)$$

где  $a(\vec{r}, t)$  — произвольная достаточно гладкая скалярная, векторная или в общем случае тензорная величина;  $d\omega = dx_1 dx_2 dx_3$  — элемент объема физического пространства;  $\vec{V}(\vec{r}, t)$  — скорость движения жидкости в момент времени  $t$  в точке, определяемой радиус-вектором  $\vec{r}$ ;  $\vec{n}$  — внешняя нормаль к поверхности  $\partial\Omega_t$ , а  $ds$  — элемент ее площади.

Полагая в тождестве (1)  $a = \rho(\vec{r}, t)$  — плотность среды и используя формулу Гаусса—Остроградского

$$\iint_{\partial\Omega_t} \rho(\vec{r}, t) (\vec{V} \cdot \vec{n}) ds = \iiint_{\Omega_t} \text{div}(\rho \vec{V}) d\omega,$$

получаем тождество

$$\frac{d}{dt} \iiint_{\Omega_t} \rho(\vec{r}, t) d\omega = \iiint_{\Omega_t} \left[ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{V}) \right] d\omega. \quad (2)$$

В рассматриваемой задаче нет внутренних источников производства или поглощения массы. Поэтому из закона сохранения массы следует, что

$$\frac{d}{dt} \iiint_{\Omega_t} \rho(\vec{r}, t) d\omega = 0,$$

и, соответственно, из (2) получается обычное уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{V}) = 0. \quad (3)$$

Таким образом, уравнение неразрывности (3) эквивалентно следующему используемому нами далее уравнению, выражающему закон сохранения массы в балансной интегральной форме:

$$\iiint_{\Omega_t} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\omega + \iint_{\partial\Omega_t} \rho(\vec{r}, t) (\vec{V} \cdot \vec{n}) ds = 0. \quad (4)$$

Для вывода уравнения движения поступаем следующим образом. Применяем второй закон Ньютона к подвижному "жидкому" объему  $\Omega_t$ , рассматривая его как материальное тело, а оставшуюся часть жидкости — как действующие на него внешние силы, обусловленные вязкостью и статическим давлением. Имеем

$$\frac{d}{dt} \iiint_{\Omega_t} \rho \vec{V}(\vec{r}, t) d\omega = \iiint_{\Omega_t} \rho(\vec{r}, t) \vec{g} d\omega + \iint_{\partial\Omega_t} \vec{\tau} \cdot \vec{n} ds + \iiint_{\Omega_t} \delta_{\Sigma}(\vec{r} - \vec{r}_{\Sigma}) \vec{\tau}_T \cdot \vec{n}_{\Sigma} d\omega, \quad (5)$$

где  $\vec{g}$  — вектор ускорения свободного падения;  $\vec{\tau}$  — тензор напряжения;  $\vec{\tau}_T$  — тензор диссипации тепловой энергии;  $\delta_\Sigma(\vec{r} - \vec{r}_\Sigma)$  — дельта-функция Дирака, ассоциированная с поверхностью теплоподвода  $\Sigma$ . Тензор  $\vec{\tau}_T$  действует на подвижный объем  $\Omega_t$  лишь в случае его пересечения поверхности теплоподвода  $\Sigma$ . Таким образом, согласно определению дельта-функции  $\delta_\Sigma$  справедливо представление (см. рисунок)

$$\iiint_{\Omega_t} \delta_\Sigma(\vec{r} - \vec{r}_\Sigma) \vec{\tau}_T \cdot \vec{n}_\Sigma d\omega = \begin{cases} \vec{\tau}_T(\vec{r}_\Sigma) \cdot \vec{n}_\Sigma & \text{при } \Omega_t \cap \Sigma \neq \emptyset, \\ 0 & \text{при } \Omega_t \cap \Sigma = \emptyset. \end{cases}$$

Далее, полагая в (1)  $a = \rho \vec{V}$  и используя формулу Грина интегрирования по частям [10], получаем тождество

$$\frac{d}{dt} \iiint_{\Omega_t} \rho \vec{V}(\vec{r}, t) d\omega = \iiint_{\Omega_t} \left[ \frac{\partial(\rho \vec{V})}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla)(\rho \vec{V}) + (\rho \vec{V}) \operatorname{div}(\vec{V}) \right] d\omega. \quad (6)$$

Введя в рассмотрение изотропный тензор  $p(\vec{r}, t) \vec{I}$ , где  $\vec{I}$  — единичный тензор, получим представление  $\vec{\tau} = -p(\vec{r}, t) \vec{I} + \vec{\sigma}$ , где  $\vec{\sigma}$  — неравновесный тензор напряжения трения, который для ньютоновской жидкости в координатах имеет вид [10]

$$\sigma_{ij} = \mu \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) + \xi \delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k},$$

где  $\mu$  — молекулярная вязкость,  $\xi$  — объемная (вторая) вязкость. Вновь воспользовавшись формулой Гаусса—Остроградского, получим

$$\iint_{\partial \Omega_t} \vec{\tau} \cdot \vec{n} ds = - \iiint_{\Omega_t} \operatorname{grad}[p(\vec{r}, t)] d\omega + \iiint_{\Omega_t} \operatorname{div}(\vec{\sigma}) d\omega,$$

и, таким образом, уравнение движения (5) в балансной интегральной форме окончательно запишем в виде

$$\begin{aligned} & \iiint_{\Omega_t} \left[ \frac{\partial(\rho \vec{V})}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla)(\rho \vec{V}) + (\rho \vec{V}) \operatorname{div}(\vec{V}) \right] d\omega = \\ & = \iiint_{\Omega_t} \rho(\vec{r}, t) \vec{g} d\omega - \iiint_{\Omega_t} \operatorname{grad}[p(\vec{r}, t)] d\omega + \iiint_{\Omega_t} \operatorname{div}(\vec{\sigma}) d\omega + \iiint_{\Omega_t} \delta_\Sigma(\vec{r} - \vec{r}_\Sigma) \vec{\tau}_T \cdot \vec{n}_\Sigma d\omega, \end{aligned} \quad (7)$$

или в координатной дифференциальной форме

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} = \rho g_i - \frac{\partial(\Pi_{ik} - \sigma_{ik})}{\partial x_k} + \delta_\Sigma(\vec{r} - \vec{r}_\Sigma) \tau_T^{ik} n_\Sigma^k, \quad (8)$$

где  $\Pi_{ik} = p \delta_{ik} + \rho v_i v_k$  — тензор плотности потока импульса [10].

В силу уравнения неразрывности (3), с учетом явного вида компонент  $\sigma_{ij}$  тензора напряжения трения и следующего тождества:

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_k)}{\partial x_k} = \rho \left( \frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \right) + v_i \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_k)}{\partial x_k} \right) = \rho \left( \frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \right),$$



уравнение (8) запишем в виде

$$\rho \left( \frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \right) = \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \Delta v_i + \left( \xi + \frac{\mu}{3} \right) \frac{\partial^2 v_k}{\partial x_i \partial x_k} + \delta_\Sigma (\bar{r} - \bar{r}_\Sigma) \tau_T^{ik} n_\Sigma^k.$$

Отметим также, что при отсутствии теплоподвода для несжимаемой среды с постоянной плотностью  $\rho = \text{const}$ , согласно (3)  $\partial v_k / \partial x_k = 0$ , и из последнего уравнения получаем обычное уравнение Навье—Стокса для несжимаемой жидкости

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} = g_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_k^2},$$

где  $\nu = \mu / \rho$  — кинематическая вязкость.

В уравнении (8) остается неизвестной величина  $\tau_T^{ik}$ , уравнение для которой нами далее будет получено как следствие закона сохранения энергии. Перейдем к составлению уравнения энергии в рассматриваемой нами задаче. Обозначим через  $u(\bar{r}, t)$  внутреннюю энергию единицы массы среды. Тогда полная энергия в объеме  $\Omega_t$  определяется интегралом

$$E = \iiint_{\Omega_t} \rho \left( u + \frac{|\bar{V}|^2}{2} \right) d\omega.$$

Полагая в тождестве (1)

$$a = \rho \left( u + \frac{|\bar{V}|^2}{2} \right),$$

получаем

$$\frac{dE}{dt} = \iiint_{\Omega_t} \frac{\partial}{\partial t} \rho \left( u + \frac{|\bar{V}|^2}{2} \right) d\omega + \iint_{\partial\Omega_t} \rho \left( u + \frac{|\bar{V}|^2}{2} \right) (\bar{V} \cdot \bar{n}) ds. \quad (9)$$

Выясним теперь, какую работу производят силы, действующие на рассматриваемый подвижный элемент среды  $\Omega_t$ . В единицу времени над данным элементом производится:

$$- \iint_{\partial\Omega_t} p (\bar{V} \cdot \bar{n}) ds \quad \text{— работа сил давления,}$$

$$\iint_{\partial\Omega_t} (\bar{\sigma} \cdot \bar{n}) \cdot \bar{V} ds \quad \text{— работа сил вязкого трения,}$$

$$\iiint_{\Omega_t} \delta_\Sigma (\bar{r} - \bar{r}_\Sigma) (\bar{\tau}_T \cdot \bar{n}_\Sigma) \cdot \bar{V} d\omega \quad \text{— работа сил "расширения—сжатия"}$$

в окрестности поверхности  $\Sigma$ . Когда объем  $\Omega_t$  имеет непустое пересечение с поверхностью теплоподвода  $\Sigma$ , в его внутрь через каждый элемент поверхности  $\Omega_t \cap \Sigma$  в единицу времени передается теплота  $q(\bar{r}_\Sigma, t)$ . Суммируя с помощью дельта-функции  $\delta_\Sigma$  эти элементарные тепловые потоки, окончательно приходим к заключению, что суммарное количество

теплоты, получаемое подвижным объемом  $\Omega_t$  в единицу времени при прохождении им поверхности теплоподвода  $\Sigma$ , определяется следующим интегралом:

$$\iiint_{\Omega_t} \delta_{\Sigma}(\vec{r} - \vec{r}_{\Sigma}) q(\vec{r}, t) d\omega.$$

Согласно закону сохранения энергии имеем

$$\begin{aligned} & \iiint_{\Omega_t} \frac{\partial}{\partial t} \rho \left( u + \frac{|\vec{V}|^2}{2} \right) d\omega + \iint_{\partial\Omega_t} \rho \left( u + \frac{|\vec{V}|^2}{2} \right) (\vec{V} \cdot \vec{n}) ds = - \iint_{\partial\Omega_t} p (\vec{V} \cdot \vec{n}) ds + \iint_{\partial\Omega_t} (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{V} ds + \\ & + \iiint_{\Omega_t} \rho (\vec{g} \cdot \vec{V}) d\omega + \iiint_{\Omega_t} \delta_{\Sigma}(\vec{r} - \vec{r}_{\Sigma}) (\vec{\tau}_T \cdot \vec{n}_{\Sigma}) \cdot \vec{V} d\omega + \iiint_{\Omega_t} \delta_{\Sigma}(\vec{r} - \vec{r}_{\Sigma}) q(\vec{r}, t) d\omega, \end{aligned}$$

или после преобразования с помощью формул Грина поверхностных интегралов в объемные

$$\begin{aligned} & \iiint_{\Omega_t} \left( \frac{\partial}{\partial t} + \text{div} \right) \left( \rho u + \frac{\rho |\vec{V}|^2}{2} \right) d\omega = \iiint_{\Omega_t} \text{div} (\vec{\sigma} \cdot \vec{V} - p \vec{V}) d\omega + \\ & + \iiint_{\Omega_t} \rho (\vec{g} \cdot \vec{V}) d\omega + \iiint_{\Omega_t} \delta_{\Sigma}(\vec{r} - \vec{r}_{\Sigma}) (\vec{\tau}_T \cdot \vec{n}_{\Sigma}) \cdot \vec{V} d\omega + \iiint_{\Omega_t} \delta_{\Sigma}(\vec{r} - \vec{r}_{\Sigma}) q(\vec{r}, t) d\omega. \end{aligned} \quad (10)$$

Последнее уравнение и выражает собой в балансной интегральной форме закон сохранения энергии для рассматриваемого случая (см. рисунок). Упростим несколько это уравнение с целью получения той его формы, в которой записывают уравнение энергии при формулировке первого начала термодинамики. Прежде всего, учитывая уравнение неразрывности (3), левую подынтегральную часть в (10) представим в виде

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\partial}{\partial t} + \text{div} \right) \left( \rho u + \frac{\rho |\vec{V}|^2}{2} \right) = \rho \frac{\partial}{\partial t} \left( u + \frac{|\vec{V}|^2}{2} \right) + \rho \vec{V} \text{div} \left( u + \frac{|\vec{V}|^2}{2} \right) + \\ & + \rho \left( u + \frac{|\vec{V}|^2}{2} \right) \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{V}) \right) = \rho \frac{d}{dt} \left( u + \frac{|\vec{V}|^2}{2} \right), \end{aligned}$$

а также учитывая, что

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{V} \text{grad}(\rho), \quad \text{div} \vec{V} = - \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = \rho \frac{d}{dt} \frac{1}{\rho}, \quad \rho \frac{dp}{d\rho} - \text{div}(p \vec{V}) \frac{\partial p}{\partial t},$$

после прибавления  $\rho \frac{dp}{d\rho}$  к обеим частям уравнения (10) окончательно запишем его в виде

$$\begin{aligned} & \iiint_{\Omega_t} \rho \frac{d}{dt} \left( u + \frac{|\vec{V}|^2}{2} + \frac{p}{\rho} \right) d\omega = \iiint_{\Omega_t} \text{div} (\vec{\sigma} \cdot \vec{V}) d\omega + \iiint_{\Omega_t} \frac{\partial p}{\partial t} d\omega + \\ & + \iiint_{\Omega_t} \rho (\vec{g} \cdot \vec{V}) d\omega + \iiint_{\Omega_t} \delta_{\Sigma}(\vec{r} - \vec{r}_{\Sigma}) (\vec{\tau}_T \cdot \vec{n}_{\Sigma}) \cdot \vec{V} d\omega + \iiint_{\Omega_t} \delta_{\Sigma}(\vec{r} - \vec{r}_{\Sigma}) q(\vec{r}, t) d\omega. \end{aligned} \quad (11)$$

Из уравнения (11) получаем уравнение для компонент тензора диссипации тепловой энергии

$$\bar{\tau}_T = \left\| \tau_T^{ik} \right\|_{i,k=1;3}$$

$$\tau_T^{ik} n_\Sigma^i w_k = C - \frac{\partial(\sigma_{ik} w_i)}{\partial x_k} - \rho g_k w_k, \quad (12)$$

где

$$C = \rho \frac{d}{dt} \left( u + \frac{|\vec{V}|^2}{2} + \frac{p}{\rho} \right) - \frac{\partial p}{\partial t} - q(\vec{r}_\Sigma, t), \quad \vec{V} = (w_i)_{i=1;3}.$$

**Компоненты тензора диссипации тепловой энергии для одномерного установившегося течения невязкого газа.** В предположении одномерного установившегося движения гидравлически идеального (невязкого) газа тензор диссипации тепловой энергии имеет одну компоненту  $\tau_T^{11}$  и уравнение (12) принимает вид

$$\frac{\partial E}{\partial x} = -\frac{\tau_T^{11}}{\rho} + \frac{q}{\rho w}, \quad (13)$$

где

$$E = u + \frac{w^2}{2} + \frac{p}{\rho}$$

и учтено, что в этом случае  $\vec{V}(\vec{r}) = w(x)\vec{e}_r$ ,  $\vec{r} = x\vec{e}_r$ ,  $\text{grad} = \frac{\partial}{\partial x}$ .

Полагая

$$\Delta h_T = \int_{x_1}^{x_2} \frac{\tau_T^{11}}{\rho} dx, \quad q^* = \int_{x_1}^{x_2} \frac{q}{\rho w} dx,$$

из (12) получаем уравнение энергии в форме 1-го закона термодинамики для потока идеального газа

$$E_1 + q^* = E_2 + \Delta h_T, \quad (14)$$

где  $\Delta h_T$  — потери энергии из-за теплового сопротивления,  $q^*$  — подводимый удельный тепловой поток. При политропном подводе теплоты, когда

$$q^* = c_v \frac{n-k}{n-1} (T_2 - T_1),$$

где  $c_v$  — удельная теплоемкость изохорного процесса,  $n$  и  $k$  — соответственно показатели политропы и адиабаты, с учетом того, что

$$\frac{p_2}{\rho_2} - \frac{p_1}{\rho_1} = R(T_2 - T_1), \quad R(T_2 - T_1) = c_v(k-1)(T_2 - T_1),$$

уравнение (14) позволяет определить  $\Delta h_T$  в виде

$$\Delta h_T = n \left( \frac{k-1}{1-n} \right) c_v (T_2 - T_1) + \frac{w_2^2 - w_1^2}{2},$$

откуда, полагая  $h_T = \rho_1 \Delta h_T$ , для теплового сопротивления, выраженного в единицах давления, получаем выражение [9]

$$h_T = n\rho_1 \left( \frac{k-1}{1-n} \right) c_v (T_2 - T_1) + \frac{\rho_1 \omega_1^2}{2} \left[ 1 - \left( \frac{T_1}{T_2} \right)^{\frac{2}{n-1}} \right]. \quad (15)$$

Таким образом, выполнение неравенства

$$\frac{\partial h_T}{\partial \omega_2} < 0 \quad (16)$$

является необходимым условием для потери устойчивости стационарного течения газа и самовозбуждения термоакустических автоколебаний. При выполнении обратного неравенства стационарный режим является устойчивым или возможно "жесткое" возбуждение автоколебаний [8].

Для возможности вычисления производной  $\partial h_T / \partial \omega_2$  и анализа неравенства (16) необходимо конкретизировать структуру теплоподвода. Будем предполагать, что отсутствует теплообмен с внешней средой и подвод теплоты к газу осуществляется с постоянной мощностью  $W$ , например конвективно от спирали электронагревателя. Из условия теплового баланса, при стационарном течении газа, получаем следующее уравнение:

$$W = c_{\Pi} m (T_2 - T_1), \quad (17)$$

где  $m = \rho \omega$  — удельный массовый расход газа. Предполагая, что  $\rho_1 = \text{const}$  и  $T_1 = \text{const}$ , приходим к следующему алгоритму для определения зависимости  $h_T = h_T(\omega_2)$ . Рассматривая температуру  $T_2$  как варьируемый параметр, определяем выражения для зависимостей  $h_T = h_T(T_2)$  и  $\omega_2 = \omega_2(T_2)$ , из которых, исключая  $T_2$ , получаем необходимое выражение для  $h_T(\omega_2)$ .

Действительно, с учетом, что

$$\omega_1 = \frac{\rho_2}{\rho_1} \omega_2,$$

выражение для  $h_T(T_2)$  следует из соотношения (15). Зависимость  $\omega_T(T_2)$  определяется из уравнения теплового баланса (17):

$$\omega_2 = \frac{m_2}{\rho_2}, \quad m_2 = \frac{W}{c_{\Pi} (T_2 - T_1)}, \quad \rho_2 = \rho_1 \left( \frac{T_2}{T_1} \right)^{\frac{1}{n-1}}. \quad (18)$$

Из соотношений (18) следует, что

$$\omega_2 = \frac{n-1}{n-k} \frac{W}{\rho_1 c_v} \left( \frac{T_2}{T_1} \right)^{\frac{1}{1-n}} \frac{1}{T_2 - T_1}, \quad \frac{\partial \omega_2}{\partial T_2} = \frac{\omega_2}{T_2 - T_1} \left[ \frac{1}{1-n} \left( 1 - \frac{T_1}{T_2} \right) - 1 \right]. \quad (19)$$

Поэтому, полагая

$$\gamma_{n,k} = \text{sgn} \left[ \frac{1}{n-k} \left( \frac{T_1}{T_2} - n \right) \right],$$

где  $\text{sgn}$  — стандартная знаковая функция, и учитывая, что  $T_1 < T_2$ , из (19) получаем, что имеет место равенство

$$\text{sgn} \left[ \frac{\partial w_2}{\partial T_2} \right] = \gamma_{n,k}. \quad (20)$$

Элементарно проверяется, что

$$\gamma_{n,k} = \begin{cases} 1, & \text{если } T_1 / T_2 < n < k, \\ -1, & \text{если } n \in (-\infty; T_1 / T_2) \cup (k; +\infty). \end{cases}$$

Далее, с учетом, что

$$\frac{\partial h_T}{\partial w_2} = \frac{\partial h_T / \partial T_2}{\partial w_2 / \partial T_2},$$

согласно (20) неравенство (16) эквивалентно неравенству

$$\gamma_{n,k} \frac{\partial h_T}{\partial T_2} < 0.$$

При этом

$$\frac{\partial h_T}{\partial T_2} = \frac{1}{T_1} \frac{df_n(x)}{dx} \Big|_{x=\frac{T_2}{T_1}}, \quad f_n(x) = C_0 n \left( \frac{k-1}{1-n} \right) (x-1) + C_1 \left( \frac{n-1}{n-k} \right)^2 \left[ \frac{1-x^{\frac{2}{1-n}}}{(x-1)^2} \right], \quad (21)$$

где

$$C_0 = \rho_1 c_v T_1, \quad C_1 = \frac{W^2}{2\rho_1 T_1^2 c_v^2}.$$

Таким образом, согласно (21) условие неустойчивости стационарного течения идеально-го газа в рассматриваемой задаче окончательно запишется в форме следующего неравенства:

$$\gamma_{n,k} \frac{df_n(x)}{dx} < 0. \quad (22)$$

Соответственно, при выполнении обратного неравенства стационарное течение будет устойчивым. Подчеркнем еще раз, что полученные выводы справедливы лишь при пренебрежении вязкостью газа, так как в противном случае в потоке возникает вязкостное сопротивление, которое при определенных условиях также может порождать отрицательное сопротивление и, таким образом, являться отдельным механизмом неустойчивости [11, 12].

Отметим, что при фиксированных значениях параметров потока газа до области теплоподвода и показателя политропы  $n$  возможны различные случаи характера устойчивости стационарного течения. Вероятно, что неравенство (22) выполняется всюду или же всюду выполняется обратное неравенство. Также возможно, что уравнение  $df_n(x)/dx = 0$  имеет действительные корни. В последнем случае возникают области устойчивости и неустойчивости стационарного течения. Например, при изобарном подводе теплоты в канале неизменного сечения с постоянной мощностью теплового потока  $W$  справедливо

$$\gamma_{0,k} = -1, \quad f_0(x) = \frac{C_1}{k^2} \left( \frac{1+x}{1-x} \right), \quad \frac{df_0(x)}{dx} = \frac{C_1}{k^2} \frac{2}{(x-1)^2} > 0 \quad \forall x > 1.$$

Поэтому в этом случае подвод теплоты при постоянном давлении приводит к абсолютной неустойчивости стационарного течения невязкого газа. При подводе теплоты к газу с показателем политропы  $n=2$  стационарное течение, наоборот, является абсолютно устойчивым. Действительно, в этом случае

$$\gamma_{2,k} = -1, \quad f_2(x) = -2(k-1)C_0(x-1) + \frac{C_1}{(2-k)^2} \frac{x+1}{x^2(x-1)}, \quad \frac{df_2(x)}{dx} < 0 \quad \forall x > 1.$$

Таким образом, исследована задача трехмерного движения реального газа при локальном подводе к нему теплоты. В соответствии с подходом Б.В. Раушенбаха зона теплоподвода условно аппроксимирована некоторой поверхностью, на которой терпят разрыв гидродинамические и термодинамические параметры потока газа. Вместо традиционного рассмотрения граничных условий на данной поверхности в уравнении движения с помощью дельта-функции Дирака явно выделено слагаемое в виде тензора диссипации тепловой энергии, который ассоциирован с данной поверхностью. Как следствие применения закона сохранения энергии к элементарному объему, составленному из частиц движущейся среды, получено уравнение для компонент данного тензора. Рассмотрены некоторые частные случаи применения полученной общей математической модели. Для одномерного установившегося течения идеального газа тензор диссипации тепловой энергии преобразуется в тепловое сопротивление, которое является местным гидравлическим сопротивлением области теплоподвода.

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Худяев С.И., Ушаковский О.В. Пространственная неоднородность и автоколебания при течении структурированной жидкости. *Матем. моделирование*. 2002. **14**, № 7. С.53–73.
2. Мелких А.В., Селезнев В.Д. Автоколебания неизотермического течения вязкой жидкости в канале. *ТВТ*. 2008. **46**, № 1. С.100–109.
3. Беляев Н.М., Белик Н.П., Польшин А.В. Термоакустические колебания газожидкостных потоков в сложных трубопроводах энергетических установок. Киев: Высш. шк., 1985. 160 с.
4. Гоцуленко В.В. Математическое моделирование особенностей феномена Рийке при изменении мощности теплового потока. *Матем. моделирование*. 2004. **16**, № 9. С. 23–28.
5. Басок Б.И., Гоцуленко В.В. Теория феномена Рийке в системе с сосредоточенными параметрами. *Акуст. вестн.* 2010. **13**, № 3. С. 3–8.
6. Абрамович Г.Н. Прикладная газовая динамика. Москва: Наука, 1969. 824 с.
7. Раушенбах Б.В. Вибрационное горение. Москва: Физматгиз, 1961. 500 с.
8. Ланда П.С. Нелинейные колебания и волны. Москва: ЛИБРОКОМ, 2010. 552 с.
9. Басок Б.И., Гоцуленко В.В. Отрицательное тепловое сопротивление в одномерном установившемся течении совершенного невязкого газа. *Труды МФТИ*. 2014. **6**, № 4. С. 153–157.
10. Курбатова Г.И., Филиппов В.Б. Элементы тензорного исчисления. Основы моделирования движущихся сплошных сред. Санкт-Петербург: Изд-во СПбГУ, 2003. 232 с.
11. Басок Б.И., Гоцуленко В.В. Автоколебания в трубе Рийке при расположении ресивера на ее входе. *Теплофизика и аэромеханика*. 2014. **21**, № 4. С. 487–496.
12. Basok B.I., Gotsulenko V.V. Regularities of thermoacoustic oscillations in lehmann's plant with a coolant moving in reverse. *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2017. **9**, Iss. 6. P. 669–678.

Поступило в редакцию 05.11.2017

REFERENCES

1. Khudyaev, S. I. & Ushakovskii, O. V. (2002). Space nonuniformity and auto-oscillations in the structured liquid flow. *Matem. Modelirovanie*, 14, No. 7, pp. 53-73 (in Russian).
2. Melkikh, A. V. & Seleznev, V. D. (2008). Self-oscillations of nonisothermal flow of viscous liquid in a channel. *High Temperature*, 46, Iss. 1, pp. 91-99 (in Russian).
3. Belyaev, N. M., Belik, N. P. & Pol'shin, A. V. (1985). Thermoacoustic vibrations of gas-liquid flows in complex pipes of power plants. Kiev: Vysshaya shkola (in Russian).
4. Gotsulenko, V. V. (2004). Mathematical modelling of Rijke's phenomenon peculiarities when changed the heat flow power. *Matem. Modelirovanie*, 16, No. 9, pp. 23-28 (in Russian).
5. Basok, B. I. & Gotsulenko, V. V. (2010). A theory of the Rijke phenomenon in a system with lumped parameters. *Acoustic bulletin*, 13, No. 3, pp. 3-8 (in Russian).
6. Abramovich, G. N. (1969). Applied gas dynamics. Moscow: Nauka (in Russian).
7. Rauschenbach, B. V. (1961). Vibrating burning. Moscow: Fizmatgiz (in Russian).
8. Landa, P. S. (2010). Nonlinear oscillations and waves. Moscow: LIBROKOM (in Russian).
9. Basok, B. I. & Gotsulenko, V. V. (2014). Negative thermal resistance in the one-dimensional steady flow of a perfect inviscid gas. *Proceedings of MIPT*, 6, No. 2, pp. 153-157 (in Russian).
10. Kurbatova, G. I. & Filippov, V. B. (2002). Elements of tensor calculus. Fundamentals of modeling moving continua. St.-Petersburg: Izd-vo SPbGU (in Russian).
11. Basok, B. I. & Gotsulenko, V. V. (2014). Self-oscillations in a Rijke tube with receiver positioning at its entrance. *Thermophysics and Aeromechanics*, 21, Iss. 4, pp. 469-478.
12. Basok, B. I. & Gotsulenko, V. V. (2017). Regularities of thermoacoustic oscillations in lehmann's plant with a coolant moving in reverse. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 9, Iss. 6, pp. 669-678.

Received 05.11.2017

*Б.І. Басок, В.В. Гоцуленко*

Інститут технічної теплофізики НАН України, Київ  
E-mail: gosul@ukr.net

МЕХАНІЗМИ ТЕПЛОГІДРОДИНАМІЧНОЇ НЕСТІЙКОСТІ  
ЗА УМОВ ЛОКАЛЬНОГО ПІДВЕДЕННЯ ТЕПЛОТИ ДО ГАЗУ

Побудовано математичну модель нестационарних рухів газу за умов локального підведення до нього теплоти вздовж деякої поверхні. У рівнянні руху для розглянутої задачі конкретизовано тензор дисипації теплової енергії, що асоційований з поверхнею теплопідведення і характеризує наявність від'ємного теплового опору. Одержано рівняння на компоненти даного тензора і розглянуто деякі його окремі випадки.

**Ключові слова:** тензор дисипації теплової енергії, "від'ємний" тепловий опір, нестійкість, термоакустичні автоколивання.

*B.I. Basok, V.V. Gotsulenko*

Institute of Technical Heat Physics of the NAS of Ukraine, Kiev  
E-mail: gosul@ukr.net

MECHANISMS OF HEAT-HYDRODYNAMIC INSTABILITY  
WITH LOCAL HEAT SUPPLY TO GAS

A mathematical model of nonstationary gas motions with a local supply of heat to a gas along a certain surface is developed. In the equations of motion, the heat energy dissipation tensor associated with the heat supply surface and characterizing the presence of a negative thermal resistance is specified. An equation is obtained for the components of the given tensor, and some of its particular cases are considered.

**Keywords:** thermal energy dissipation tensor, "negative" thermal resistance, instability, thermoacoustic self-oscillations.

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.03.080>

УДК 541.18.02:550.26

**С.В. Кушнір**

Інститут геології і геохімії горючих копалин НАН України, Львів

E-mail: igggk@mail.lviv.ua

## **Вплив структурування у воді на тиск її насичених парів та величину поверхневого натягу**

*Представлено академіком НАН України Є.Ф. Шнюковим*

*На основі припущення, що однорідно структуровані рідини мають постійну енергію активації, виведено дві функції: для тиску насичених парів —  $\sqrt[3]{P} = f(T)$ , та поверхневого натягу води —  $\sqrt{\sigma} = f(T)$ , які можуть зберігати пряmlinійність у термобаричних умовах існування відповідної структури. Розрахунки показали, що перша функція добре описує 4-стадійність змін структури води під час нагрівання і придатна для аналізу структурування в інших рідинах. Друга функція підтверджує однорідність структур поверхні інтерфейсу у водах типів I і II та відсутність поверхневої структуризації у водах типів III і IV.*

**Ключові слова:** вода, структурування, структурно-залежні властивості, математичні функції, молекулярні рідини.

Випаровування води відіграє величезну роль у багатьох природних і технологічних процесах (утворення соляних озер і морських евапоритів, формування хмар та кліматичних зон, парові машини і парові технології тощо). Фізичні характеристики цього процесу вивчені вже досить добре [1–3]. Але молекулярна природа цього явища все ще залишається малозрозумілою [4]. Більшість дослідників вважає, що випаровування — це виділення з води окремих молекул  $H_2O$ . Проте недавно виявилось, що при випаровуванні в газову фазу можуть переходити і димери  $(H_2O)_2$ , причому їх потік чомусь зростає в міру наближення до стану насичення [5]. У роботі [6] на підставі даних мас-спектроскопічних досліджень показано, що залежно від умов підготовки ненасичених парів у них можуть самочинно з'являтися асоціати  $(H_2O)_4$  і їх протонізовані аналоги.

Відомо, що тиск насичених парів води ( $P$ ) та інших рідин під час нагрівання зростає за експоненціальним законом. Тому для зручності використання цих даних їх часто задають у вигляді емпіричних рівнянь, які в координатах  $\log P = f(1/T)$  описуються майже прямими лініями. Проте в широкому діапазоні температур ці лінії виявляються кривими і розташовуються для різних рідин практично “паралельно” [1]. Отже,  $\log P$  для рідин зовсім не враховує вплив структурування, яке характерне для води та інших рідин з достатньо сильними водневими зв'язками (Н-зв'язками). Але це не означає, що не може існувати якась

© С.В. Кушнір, 2018



інша функція  $P$ , яка буде враховувати зміни структури води, зумовлені нагріванням в усій області існування її рідкої фази. За мету дослідження ставилося знайти таку функцію.

Спочатку нагадаємо сучасні уявлення про особливості структурування у воді за різних термобаричних умов, сформовані за результатами фізико-хімічного аналізу змін її ентропії під час нагрівання [7]. Молекули  $\text{H}_2\text{O}$  здатні утворювати між собою не більше чотирьох Н-зв'язків. Повністю це число зв'язків ( $z$ ) використовується лише у твердій фазі (лід). У рідкому стані це число завжди менше чотирьох. Залежно від величини  $z$  для основної маси молекул у воді може утворюватися чотири різних типи структур, які послідовно змінюють одна одну в процесі нагрівання.

Тип I.  $z = 3$  ( $0-100^\circ\text{C}$ ). Виникають об'ємні кластери  $(\text{H}_2\text{O})_n$  з  $n = 6-20$  та їх полімери. Відповідні структури відрізняються високою теплоємністю та теплотою випаровування, що робить ці води основним регулятором клімату на Землі [2].

Тип II.  $z = 2$  ( $100-220^\circ\text{C}$ ). Утворюються невеликі плоскі (циклічні) кластери  $(\text{H}_2\text{O})_m$  з  $m = 3-5$ , які забезпечують воді високу текучість і легкість фільтрації через осадові породи. Води цього типу відіграють основну роль у розвитку гідротермальних процесів у надрах Землі.

Тип III.  $z = 1$  ( $220-340^\circ\text{C}$ ). Основна маса молекул зв'язана в димерах  $(\text{H}_2\text{O})_2$ , які мають явно виражену здатність до часткової автоіонізації:



Такі води мають найсильніші кислотні властивості і, відповідно, найвищу хімічну активність. Можуть відігравати важливу роль в утворенні горючих газів із розсіяної органічної речовини в осадових породах [8].

Тип IV.  $z = 0$  ( $340-374^\circ\text{C}$ ). Молекули  $\text{H}_2\text{O}$  нездатні утворювати Н-зв'язки, тому вода стає звичайною молекулярною рідиною, яка через високу полярність молекул все ще характеризується відносно високою енергією вандерваальсівської взаємодії [1].

Підкреслимо, що взаємні переходи між різними типами структур не різкі, а поступові; причому у водах I і II типу завжди присутні незначні домішки  $\text{H}_2\text{O}$  і  $(\text{H}_2\text{O})_2$  як немінучі дефекти їх динамічних, “мерехтливих” структур.

Схематично процес випаровування води можна зобразити як реакцію розпаду її окремого структурного комплексу:



В умовах насичення швидкість випаровування дорівнює швидкості конденсації парів води. Тому величина  $P$  повинна нести певну інформацію про швидкість випаровування, яка залежить від енергії активації ( $E_{\text{акт}}$ ) процесу (2) в конкретних умовах. Цю залежність дає рівняння Арреніуса [1]:  $k = se^{-E_{\text{акт}}/RT}$ , де  $k$  – константа швидкості,  $s$  – стала величина,  $R$  – універсальна газова стала,  $T$  – абсолютна температура. Легко показати, що у разі незмінної  $E_{\text{акт}}$  функція  $\log k = f(1/T)$  стає прямою лінією, нахил якої залежить від величини  $E_{\text{акт}}$ .

Для реалізації процесу (2) необхідно, щоб усі молекули комплексу  $(\text{H}_2\text{O})_n$  віддали частину своєї теплової енергії одній із них, щоб довести її до стану  $E_{\text{акт}}$ . Очевидно, що зробити це в маленькому комплексі важче, ніж у великому. Отже, кількість молекул  $\text{H}_2\text{O}$ , що здатні випаровуватися, мусить бути залежною від об'єму (розмірів) комплексу  $(\text{H}_2\text{O})_n$ , який виділяє цю молекулу в газову фазу. Загальний розмір цього комплексу можна охарактере-

ризувати величиною  $L^3$ , де  $L$  — одиниця лінійного розміру. В такому випадку величина  $P$  повинна залежати не тільки від константи швидкості ( $k$ ), але й від  $L$ :  $P = f(kL^3)$ . Якщо така залежність дійсно існує, то крива  $\sqrt[3]{P} = f(T)$  у структурно однорідній рідині повинна мати вигляд прямої, нахил якої залежить від величини енергії активації в цій структурі.

Проте ми поки що не враховували, що випаровування нижче температури кипіння проходить тільки на поверхні води, де її структура сильно відрізняється від об'ємної [9]. Тут присутні тільки невеликі плоскі кластери  $(\text{H}_2\text{O})_4$  і  $(\text{H}_2\text{O})_5$ , які на поверхні полімеризуються з утворенням плоскої кластерної сітки, що фактично визначає величину поверхневого натягу у водах типів I і II. Якщо молекули  $\text{H}_2\text{O}$  будуть випаровуватися з цієї сітки, то сила їх зв'язування в структурі залежатиме вже не від  $L^3$ , а від  $L^2$ . У такому випадку можна очікувати, що  $P = f(kL^2)$  і прямолінійною може стати функція  $\sqrt{P} = f(T)$ .

Для перевірки цих прогнозів проведено відповідні розрахунки функцій  $\sqrt[3]{P} = f(T)$  і  $\sqrt{P} = f(T)$  для води та — для порівняння — аналогічних функцій для поверхневого натягу води, який належить до суто поверхневих властивостей. За основу для розрахунків використано довідкові дані [10], результати наведено на рис. 1. Як видно, структурування у воді впливає тільки на “кубічну” функцію  $\sqrt[3]{P} = f(T)$ , а у випадку поверхневого натягу — тільки на “квадратну” функцію  $\sqrt{\sigma} = f(T)$ . Отже, величина  $P$  чутлива лише до змін в об'ємній структурі, а  $\sigma$  — тільки до поверхневих структурних змін. Розглянемо детальніше одержані результати.

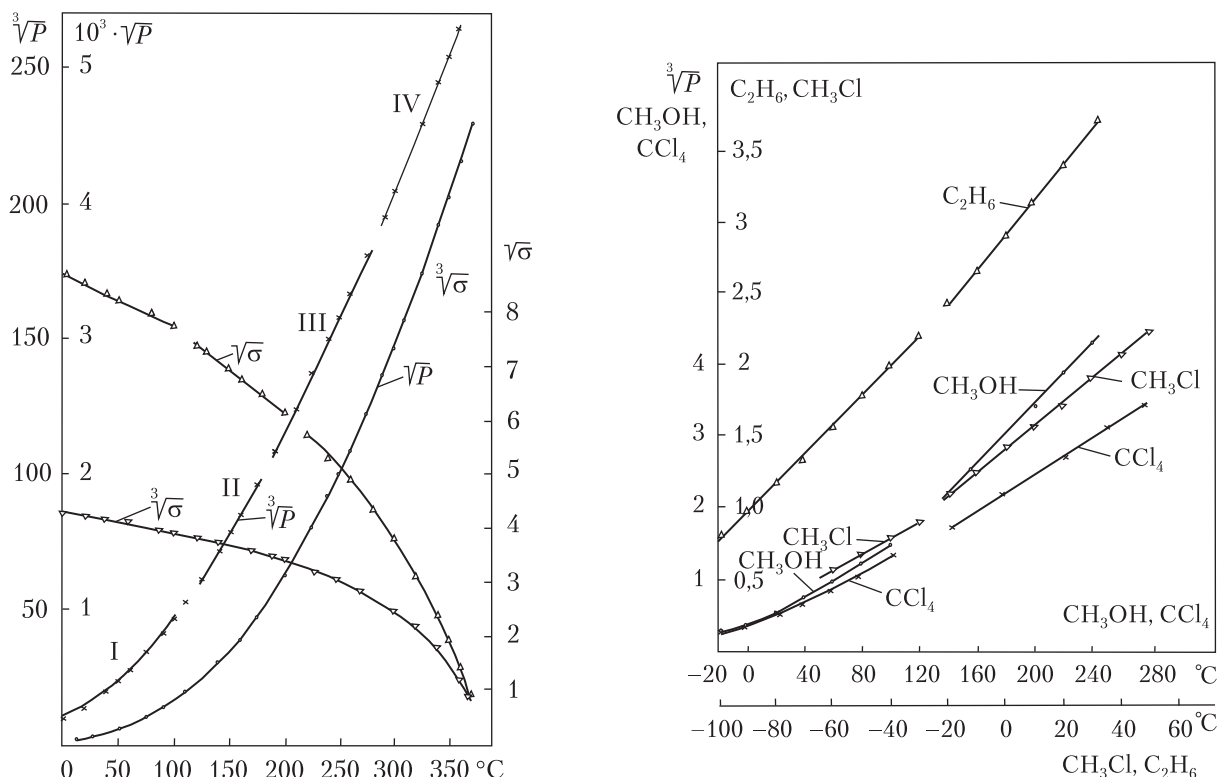
Функція  $\sqrt[3]{P} = f(T)$  набула вигляду ламаної лінії з поступовими переходами, яка складається з чотирьох ділянок: однієї криволінійної (до  $100^\circ\text{C}$ ) і трьох прямолінійних ( $100\text{--}180$ ;  $190\text{--}280$ ;  $290\text{--}374^\circ\text{C}$ ). Така картина в цілому узгоджується з висновками [7] про існування чотирьох різних типів структурування води, які змінюють один одного в процесі нагрівання. Прямолінійність трьох ділянок в області перегрітих ( $>100^\circ\text{C}$ ) вод можна трактувати як доказ їх структурної однорідності. Криволінійність цієї функції при  $t < 100^\circ\text{C}$  свідчить про неоднорідність структури води, яка в цих умовах справді є комплексом різних об'ємних кластерів і їх полімерів.

Відсутність зв'язку функції  $\sqrt{P} = f(T)$  із структурними змінами у воді свідчить про те, що інтерфейс повітря/вода не бере участі ані в термодинамічній, ані в структурній рівновазі процесу (2). Зате відомо, що цей інтерфейс знаходиться в іонно-адсорбційній рівновазі з об'ємною водою і дуже швидко обмінюється з нею енергією [11].

Важливі відомості про структурування на поверхні води дає крива  $\sqrt{\sigma} = f(T)$ . На ній бачимо дві прямолінійні ділянки (до  $100^\circ\text{C}$  і в діапазоні  $120\text{--}200^\circ\text{C}$ ), які відповідають об'ємним структурам вод I і II типів. У діапазоні вищих температур структуруваність поверхні зникає і лінія  $\sqrt{\sigma}$  стає криволінійною. В роботі [9] автор стверджував, що поверхневі сітки кластерів у водах I і II типу структурно подібні. Функція  $\sqrt{\sigma} = f(T)$  підтверджує цей висновок, але підкреслює, що ця подібність є неповною.

Щоб перевірити чутливість  $\sqrt[3]{P} = f(T)$  до структурних змін у випадку менш полярних або неполярних рідин проведено відповідні розрахунки для метанолу ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ), хлорметану ( $\text{CH}_3\text{Cl}$ ), тетрахлориду метану ( $\text{CCl}_4$ ) та етану ( $\text{C}_2\text{H}_6$ ). Важливі характеристики цих речовин зведено в таблиці. Вихідні дані  $P$  (в атм) для них взято з [12–14]. Одержані результати наведено на рис. 2.

Звернемо увагу, що перші три рідини з таблиці мають сильно полярні молекули, але з них тільки  $\text{CH}_3\text{Cl}$  не може утворювати Н-зв'язки. І це різко знизило його температуру



**Рис. 1.** Порівняння функцій  $\sqrt{X} = f(T)$  і  $\sqrt[3]{X} = f(T)$  для тиску насичених парів ( $P$ , Па) і поверхневого натягу ( $\sigma$ , дин/см) води. I–IV – термобаричні області існування різних структурних типів води

**Рис. 2.** Структурування в рідинах із слабкою міжмолекулярною взаємодією за показниками функції  $\sqrt[3]{P} = f(T)$

### Основні характеристики досліджуваних рідин

Молекулярна формула	H <sub>2</sub> O	CH <sub>3</sub> OH	CH <sub>3</sub> Cl	CCl <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
М, г/моль	18	32	50,5	153,8	30
Дипольний момент, Дб	1,84	1,706	1,86	0	0
Температура кипіння, °C	100	64,7	-22,4	76,5	-88,6

кипіння, що підкреслює слабкість звичайних вандерваальсівських зв'язків між його молекулами. Разом з тим молекули CCl<sub>4</sub> і C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> взагалі неполярні, але сильно відрізняються своїми молекулярними масами. Оскільки маса є основним фактором вандерваальсівської взаємодії, температура кипіння CCl<sub>4</sub> виявилася навіть вищою від такої для CH<sub>3</sub>OH, а C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> залишається газом, який конденсується при температурі, на 165 °C нижчій.

Як впливає з рис. 2, “кубічна” функція  $P$  і тут виправдовує наші розрахунки, але показує, що у випадку слабкої міжмолекулярної взаємодії рідини можуть мати лише два типи структур, які можна назвати низько- і високотемпературними. Для зріджених газів C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> і CH<sub>3</sub>Cl, де міжмолекулярна взаємодія найслабша, обидві структури однорідні, причому для

$C_2H_6$  різниця між цими структурами майже непомітна. Відзначимо, що для  $CH_3Cl$  перехід між цими структурами відбувається в області точки кипіння, коли загальний тиск у системі починає швидко зростати. У разі сильнішої міжмолекулярної взаємодії ( $CH_3OH$ ,  $CCl_4$ ) низькотемпературні структури подібно до води виявляються неоднорідними, а високотемпературні структури з'являються також в області вище температури кипіння. Все це дає підстави стверджувати, що існування високотемпературних структур для названих вище рідин обумовлено не температурою, а високим тиском, який дає змогу зберегти ці речовини в рідкому стані.

Сукупність одержаних результатів свідчить про те, що функція  $\sqrt[3]{P} = f(T)$  дійсно характеризує об'ємну структурованість води і її можна використовувати для вивчення структуровання в інших рідинах. Не виключено, що за графіками цих функцій вдається визначати навіть енергію активації випаровування різних молекул. Прямолинійність “кубічної” функції  $P$  для перегрітих вод типів II, III і IV свідчить не тільки про однорідність їх структур, але й про підпорядкування рівноважному процесу (2), тобто про мономолекулярний механізм їх випаровування. Для звичайних вод типу I цей механізм виявляється необов'язковим. Тому можна очікувати, що в певних умовах (наприклад, у вакуумі) випаровуватися можуть цілі фрагменти поверхні інтерфейсу у вигляді  $(H_2O)_2$ ,  $(H_2O)_4$  і  $(H_2O)_5$ . Для вивчення поверхневого структуровання може бути корисною функція  $\sqrt{X} = f(T)$  за умови, що  $X$  змінюється в досить широких межах. Проте необхідно відзначити, що обидві емпірично підтвержені функції  $P$  і  $\sigma$  ще не мають строгого теоретичного обґрунтування.

Є всі підстави очікувати, що запропоновані “кубічні” і “квадратні” функції структурно-залежних властивостей рідин зможуть знайти застосування в різних розчинах. У такому випадку можна буде говорити про появу нового виду структурного аналізу рідин, який варто назвати структуральним.

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Даниэльс Ф., Альберти Р. Физическая химия. Москва: Высш. школа, 1967. 778 с.
2. Хорн Р. Морская химия (структура воды и химия гидросферы). Москва: Мир, 1972. 398 с.
3. Антонченко В. Я., Давыдов А. С., Ильин В. В. Основы физики воды. Киев: Наук. думка, 1991. 672 с.
4. Azarkish H., Behzadmehr A., Fanaei Sheikholeslami T., Sarvari S. M. H., Fréchet L.G. Water evaporation phenomena on micro and nanostructured surfaces. *Int. J. Therm. Sci.* 2015. **90**. P. 112–121. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2014.12.005>
5. Бочкарев А. А., Полякова В. И. Эмиссия димеров со свободной поверхности нагретой воды. *Прикл. мех. и техн. физика*. 2014. **55**, № 5. С. 115–125.
6. Ходорковский М. А., Артамонова Т. О., Мурашов С. В., Michael D., Ракчеева Л. П., Беляева А. А., Тимофеев Н. А., Мельников А. С., Шахмин А. Л. Исследование состава смеси паров воды с аргонном методом масс-спектрометрии сверхзвукового молекулярного пучка. *Журн. техн. физики*. 2007. **77**, вып. 10. С. 16–23.
7. Кушнір С. Структура і властивості чистої води за різних термобаричних умов (фізико-хімічний аналіз). *Мінералог. зб.* 2012. № 62, вип. 2. С. 236–245.
8. Кушнір С. В. Вплив солоних вод на катагенетичні перетворення розсіяної органічної речовини. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 1995. № 5. С. 93–96.
9. Кушнір С. В. Причини барботажного хімічного ефекту і диференціації іонів при утворенні морських аерозолів (фізико-хімічний аналіз). *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2015. № 7. С. 91–98. doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2015.07.09>
10. Ривкин С. А., Александров А. А. Теплофизические свойства воды и водяного пара. Москва: Энергия, 1980. 423 с.

11. Smits M., Ghosh A., Sterrer M., Muller M., Bonn M. Ultrafast vibrational energy transfer between surface and bulk water at the air-water interface. *Phys. Rev. Lett.* 2007. **98**. 098302. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.098302>
12. Зубарев В. Н., Прусаков П. Г., Сергеева Л. Г. Теплофизические свойства метилового спирта. Москва: Изд-во стандартов, 1973. 202 с.
13. Трегер Ю. А., Пипенов И. Ф., Гольфанд Е. А. Справочник по физико-химическим свойствам хлороорганических соединений C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>. Ленинград: Химия, 1973. 184 с.
14. Справочник химика. Т. 1: Никольский Б.П. (гл. ред.). Ленинград, Москва: Госхимиздат, 1962. 1071 с.

Надійшло до редакції 06.10.2017

## REFERENCES

1. Daniels, R. & Alberty, P. (1967). Physical Chemistry. Moscow: Vysshaya Shkola (in Russian).
2. Horn, R. (1972). Marine chemistry (water structure and chemistry of the hydrosphere). Moscow: Mir (in Russian).
3. Antonchenko, V. Ya., Davydov, A. S. & Il'in, V. V. (1991). Foundations of physics of water. Kiev: Naukova Dumka (in Russian).
4. Azarkish, H., Behzadmehr, A., Fanaei Sheikholeslami, T., Sarvari, S. M. H. & Fréchette, L. G. (2015). Water evaporation phenomena on micro and nanostructured surfaces. *Int. J. Therm. Sci.*, 90, pp. 112-121. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jthermalsci.2014.12.005>
5. Bochkarev, A. A. & Polyakova, V. I. (2014). Emission of dimers from free-form of the heated water. *Prikl. mehanika i tehn. fizika*, 55, No. 5, pp. 115-125 (in Russian).
6. Khodorkovsky, M. A., Artamonova, T. O., Murashov, S. V., Michael, D., Rakcheeva, L. P., Belyaeva, A. A., Timofeev, N. A., Melnikov, A. S. & Shakhmin, A. L. (2007). Investigation of the composition of a mixture of water vapor with argon by the mass spectrometry method of a supersonic molecular beam. *Zhurn. tehn. fiziki*, 77, No. 10, pp. 16-23 (in Russian).
7. Kushnir, S. (2012). Structure and properties of clear water under different thermobaric conditions (physical-chemical analysis). *Mineralog. Rev.*, No. 62, Iss. 2, pp. 236-245 (in Ukrainian).
8. Kushnir, S. V. (1995). Influence of salt waters is on katagenetichni transformation of the dissipated organic matter. *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.*, No. 5, pp. 93-96 (in Ukrainian).
9. Kushnir, S. V. (2015). Reasons for the bubbling chemical effect and differentiation of ions in the formation of marine aerosols (physico-chemical analysis). *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.*, No. 7, pp. 91-97 (in Ukrainian). doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2015.07.091>
10. Rivkin, C. A. & Aleksandrov, A. A. (1980). Thermophysical properties of water and aquatic steam. Moscow: Energiya (in Russian).
11. Smits, M., Ghosh, A., Sterrer, M., Muller, M. & Bonn, M. (2007). Ultrafast vibrational energy transfer between surface and bulk water at the air-water interface. *Phys. Rev. Lett.*, 98, 098302. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.098302>
12. Zubarev, V. N., Prusakov, P. G. & Sergeeva, L. G. (1973). Thermophysical properties of methyl alcohol. Moscow: Izd-vo standartov (in Russian).
13. Treger, Yu. A., Pipenov, I. F. & Gol'fand, E. A. (1973). Handbook on physico-chemical properties of chlororganic compounds of C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub>. Leningrad: Khimiya (in Russian).
14. Nikol'skiy, B. P. (Eds.). (1962). Reference book of chemistry. Vol. 1. Leningrad, Moscow: Goshimizdat (in Russian).

Received 06.10.2017

С.В. Кушнір

Институт геологии и геохимии горючих ископаемых НАН Украины, Львов

E-mail: igggk@mail.lviv.ua

#### ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРИРОВАНИЯ В ВОДЕ НА ДАВЛЕНИЕ ЕЕ НАСЫЩЕННЫХ ПАРОВ И ВЕЛИЧИНУ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ

На основании предположения, что однородно структурированные жидкости имеют постоянную энергию активации, выведены две функции: для давления насыщенных паров —  $\sqrt[3]{P} = f(T)$  и поверхностного натяжения воды —  $\sqrt{\sigma} = f(T)$ , которые могут сохранять прямолинейность в термобарических условиях существования соответствующей структуры. Расчеты показали, что первая функция хорошо описывает 4-стадийность изменения структуры воды при нагревании и может использоваться для анализа структурирования в других жидкостях. Вторая функция подтверждает однородность структур поверхности интерфейса в водах типов I и II, а также отсутствие поверхностной структуризации в водах типов III и IV.

**Ключевые слова:** вода, структурирование, структурно-зависимые свойства, математические функции, молекулярные жидкости.

S.V. Kushnir

Institute of Geology and Geochemistry of Combustible Minerals of the NAS of Ukraine, Lviv

E-mail: igggk@mail.lviv.ua

#### INFLUENCE OF THE STRUCTURIZATION OF WATER ON THE PRESSURE OF ITS SATURATED VAPOR AND ON THE SURFACE TENSION

On the basis of the assumption that homogeneously structured liquids have a permanent energy of activation, two functions are constructed for the pressure of saturated vapors ( $\sqrt[3]{P} = f(T)$ ) and for the surface tension of water ( $\sqrt{\sigma} = f(T)$ ) that can keep straightforwardness under the thermobaric conditions of existence of the corresponding structures. Calculations have showed that the first function well describes 4-phase changes of a water structure at the heating, and it is suitable for the analysis of the structurization in other liquids. The second function confirms the homogeneity of structures of the interface in waters of I and II types and the absence of a surface structurization in waters of III and IV types.

**Keywords:** water, structurizing, structure-dependent properties, mathematical functions, molecular liquids.

---

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.03.087>

УДК 528.88: 332.33

**В.І. Лялько<sup>1</sup>, Л.О. Єлістратова<sup>1</sup>, О.А. Апостолов<sup>1</sup>,  
А.Я. Ходоровський<sup>1</sup>, В.М. Чехній<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Державна Установа “Науковий центр аерокосмічних досліджень Землі Інституту геологічних наук НАН України”, Київ

<sup>2</sup> Інститут географії НАН України, Київ

E-mail: alex@casre.kiev.ua

## **Експрес-оцінка ерозійно небезпечних ділянок ґрунтового покриву на території України з використанням даних дистанційного зондування Землі з врахуванням кліматичних факторів та рослинності**

*Представлено академіком НАН України В.І. Ляльком*

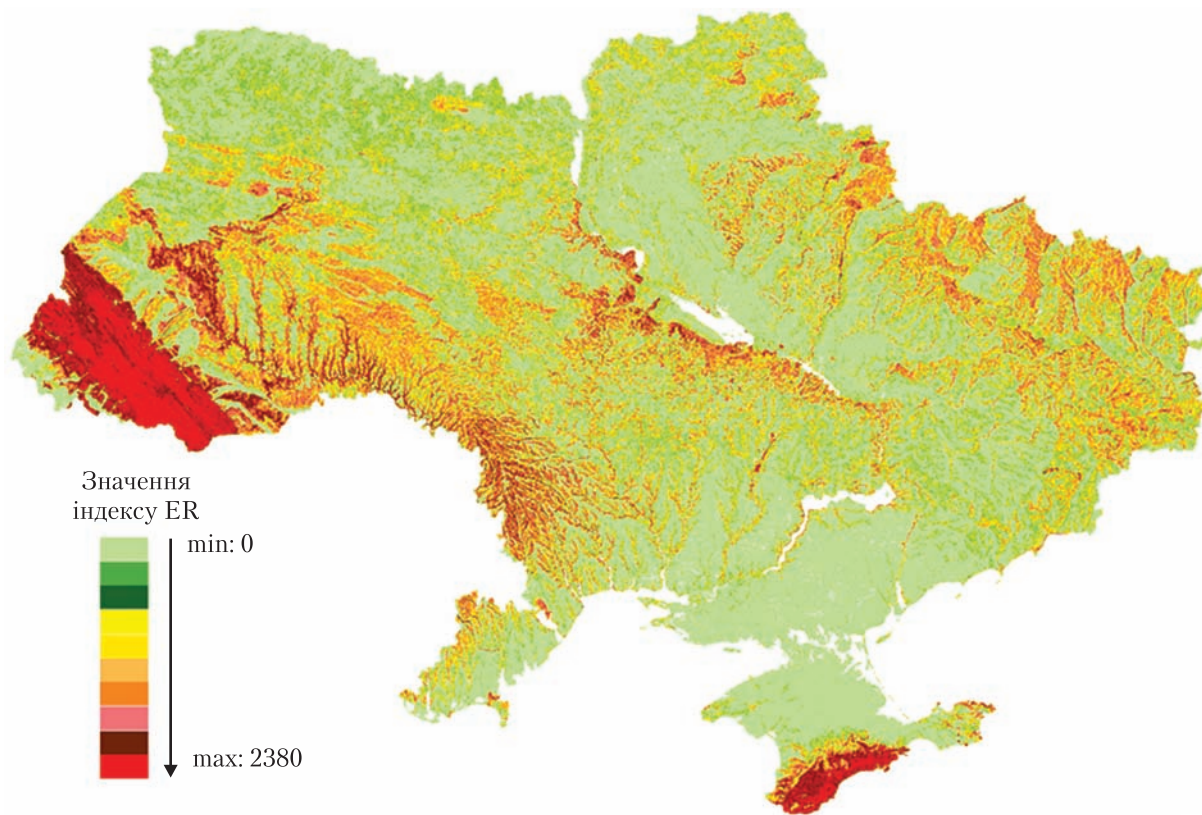
*Розроблено підхід для експрес-оцінки території за ступенем ерозійної небезпеки з використанням даних цифрової моделі рельєфу, кліматичних факторів та рослинності. Проведено експрес-оцінку ерозійно небезпечних ділянок ґрунтового покриву на території України за розробленою методикою. Здійснено ранжування потенційно небезпечних ділянок за ступенем небезпеки.*

**Ключові слова:** *ерозія ґрунтів, дистанційні методи, цифрова модель рельєфу, опади, NDVI.*

**Актуальність дослідження.** Сучасний етап розвитку людства характеризується значними темпами і масштабами перетворення природного середовища внаслідок зміни клімату. Зміна клімату зумовлює активізацію природних процесів, що призводить до значних економічних збитків. Тому надзвичайно важливим є розробка та здійснення заходів щодо протидії цим процесам. Одним із найбільш загрозливих і швидкоплинних глобальних наслідків сучасної зміни клімату є розширення територій, що зазнають опустелювання, однією з виражених складових якого є деградація ґрунтів. Вивчення розвитку цих процесів є актуальною і важливою дослідницькою проблемою, вирішення якої пов'язане не лише з детальними пошуками причин погіршення якості земель, але й передбачає визначення ризиків їх деградації. Для України, де процеси деградації ґрунтів набули значного розмаху, такі дослідження є вкрай необхідними. Через недостатнє фінансування досліджень стану ґрунтового та рослинного покривів заходи з охорони земель в Україні, що здійснювалися протягом 2007–2016 рр., виявилися незіставними з масштабами деградаційних процесів. На сьогодні в Україні понад 1 млн га деградованих малопродуктивних та техногенно забруднених земель підлягають консервації, 135 тис. га порушених земель — рекультивациі, 269 тис. га малопродуктивних — поліпшенню [1].

© В.І. Лялько, Л.О. Єлістратова, О.А. Апостолов, А.Я. Ходоровський, В.М. Чехній, 2018

ISSN 1025-6415. Допов. Нац. акад. наук Укр. 2018. № 3



**Рис. 1.** Розподіл значень індексу інтенсивності ерозійного розчленування рельєфу (*ER*) для території України за даними *DEM* з супутника Shuttle

Слід зазначити, що наявних відповідних архівних матеріалів часто недостатньо для відображення актуальних властивостей ґрунтового покриву значних за площею територій. Це обумовлює необхідність використання багатоспектральних космічних зображень як інформаційної основи, зокрема, для виявлення ризиків погіршення якості земель. При цьому основним завданням обробки багатоспектральних космічних знімків є виділення індикаторів деградації земель. У представленому дослідженні за такий індикатор було взято динаміку ерозії ґрунтів. Оцінка ерозійної небезпеки ґрунтів є важливою у прогнозуванні енергії ерозійних процесів і плануванні протиерозійних заходів.

Ми ставили за мету оцінити ерозійну небезпеку ґрунтів і земель в Україні з врахуванням кліматичних факторів, застосовуючи методи дистанційного зондування Землі (ДЗЗ).

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** Роботи з моніторингу деградаційних процесів у ДУ "Науковий центр аерокосмічних досліджень Землі ІГН НАН України" проводяться не вперше. З-поміж інших слід відмітити дослідження, в якому представлена модель оцінки ризику деградації земель, яка враховує зміни рослинного покриву і динаміки ерозії ґрунтів на прикладі визначення ризику деградації земель піщаних арен Херсонської області за два періоди: 1983–1991 рр. та 1991–2010 рр., з використанням космічних знімків Landsat 5/TM [2].

Обґрунтовано різні аспекти використання даних дистанційного зондування як складової моніторингу стану земель із застосуванням цільових геоінформаційних систем (ГІС)



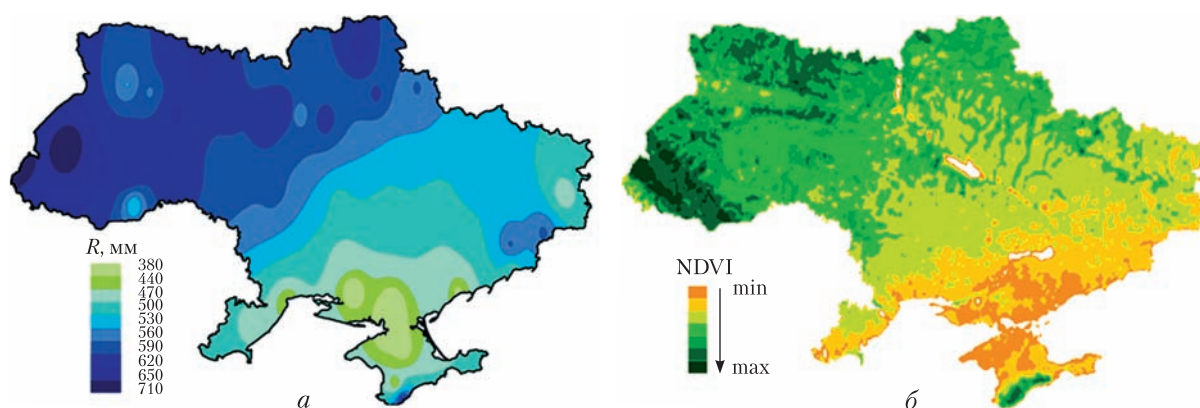
[3–6], розглянуто основні підходи до оцінювання розвитку ерозійних процесів на значних за площею територіях на основі даних ДЗЗ [7], висвітлено засади визначення потенційної небезпеки прояву ерозійних процесів за допомогою ГС-технологій [8], на підставі даних просторового геоінформаційного моделювання ерозійних втрат ґрунтів у світі та Україні обґрунтовано підходи до розробки моделей водної ерозії ґрунтів [9], визначено критерії, діагностичні параметри, кількісні та якісні оцінки деградації ґрунтів [10], проведено інтегральну оцінку інтенсивності ерозійних процесів у найбільших річкових басейнах України в балах із урахуванням показників енергії рельєфу, інтегрального коефіцієнта розчленованості і густоти розчленованості рельєфу постійними водотоками, інтенсивності площинного змиву ґрунтів, протиерозійної стійкості покривних рельєфоутворюючих порід тощо [11].

**Матеріали та методика дослідження.** Методика досліджень базується на аналізі матеріалів аерокосмічної зйомки. Перший етап – збір первинного матеріалу: цифрова модель рельєфу (*DEM*), карта деградації ґрунтів Національного атласу України, космознімки, розміщені у відкритому доступі в мережі “Інтернет” для характеристики рослинності за індексом *NDVI*, усереднена кількість опадів (*R*) за 117 років за гідрометеорологічними станціями. Другий етап – розрахунок первинних карт на всю територію України: індексу інтенсивності ерозійного розчленування рельєфу (*ER*), кількості опадів (*R*) та розподілу значень сумарного індексу (*NDVI*). Усі розрахунки виконувались із застосуванням програми по обробці космічних знімків Erdas Imagine. Третій етап – розрахунок модифікованого індексу *ER* з урахуванням кількості опадів (*R*) і рослинності за індексом *NDVI* та його аналіз.

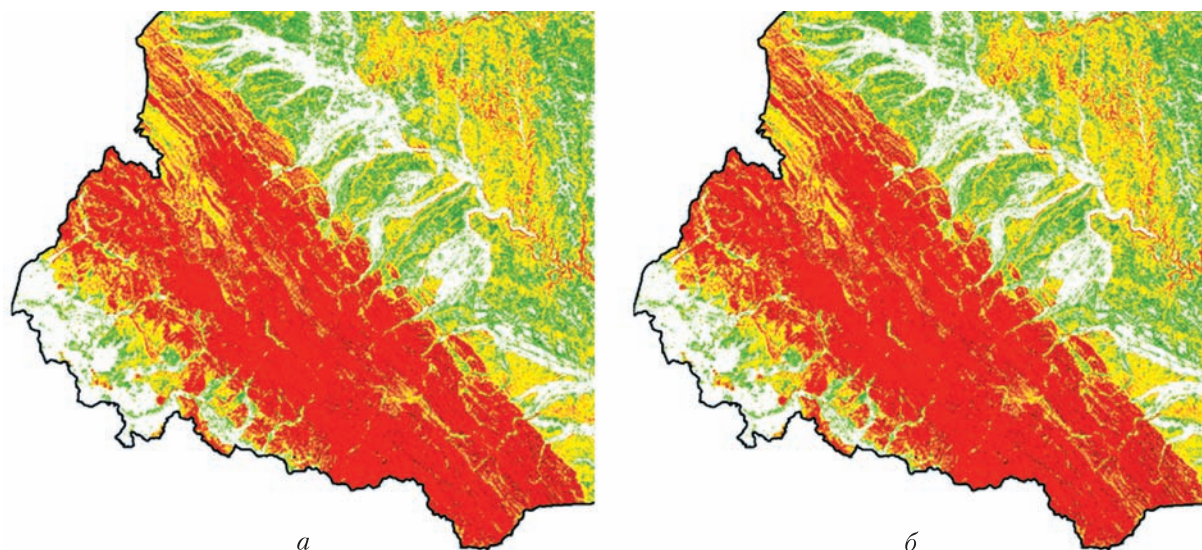
**Виклад основного матеріалу.** Розвиток ерозійних процесів на великих за площею територіях доцільно оцінювати за допомогою космічних знімків.

На рис. 1 наведено розподіл значень індексу інтенсивності ерозійного розчленування рельєфу (*ER*). Детально методику розрахунку цього індексу розкрито в роботі [12]. Визначення індексу *ER* для території України дало можливість відстежити просторовий розподіл інтенсивності ерозійних процесів ґрунтів, зокрема виділити території з найбільшою потенційною ерозійною небезпекою.

Для подальших досліджень було розраховано показники усередненої кількості опадів (*R*) та індексу рослинності *NDVI* (рис. 2).



**Рис. 2.** Карта розподілу середньорічних значень кількості опадів *R* за період з 1900–2016 рр. на території України (*а*) та карта розподілу сумарного індексу *NDVI* за квітень–жовтень 2013 р. (*б*) за продуктом MOD13 за даними супутника TERRA/MODIS



**Рис. 3.** Розподіл індексу *ER* (нормування) (*a*) та індексу *ER* з урахуванням кількості опадів *R* (нормування) (*б*) для Карпатського регіону

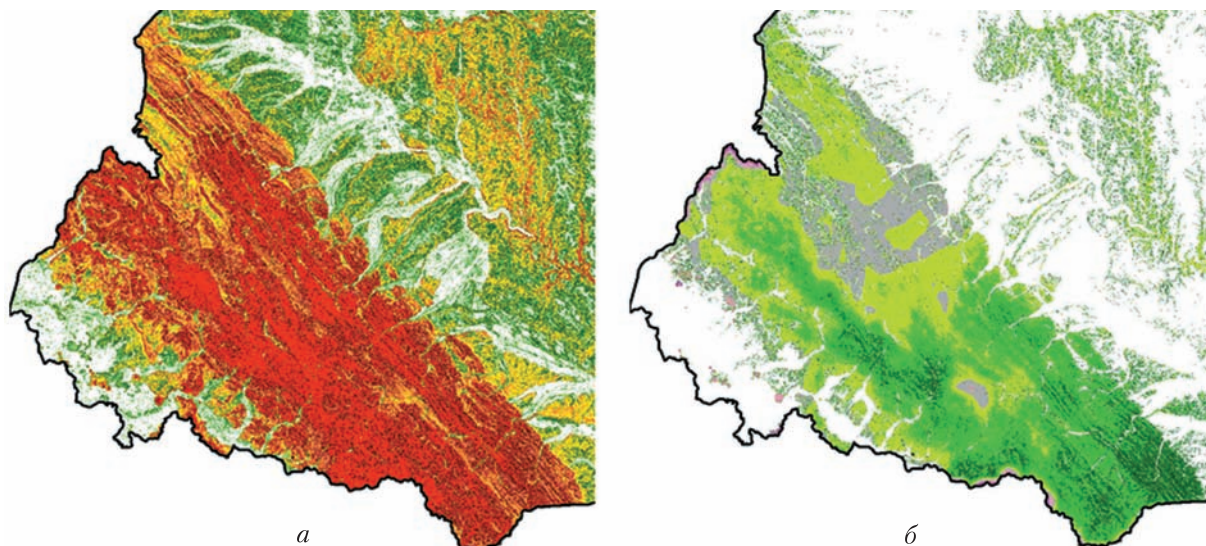
**Таблиця 1.** Оцінка впливу кліматичних факторів (опадів) на індекс *ER* для ерозійно небезпечних ділянок території Карпат

Номер класу	Вплив кількості опадів ( <i>R</i> ) на індекс <i>ER</i>	Відсоток території дослідження, зайнятий класом
1	Відсутній	1,75
2	Слабкий (3–10 %)*	30,74
3	Помірний (10–17 %)	26,05
4	Істотний (17–23 %)	20,86
5	Сильний (23–30 %)	10,90
6	Дуже сильний (30–37 %)	6,12
7	Катастрофічний (>37 %)	3,57

\* Тут і в табл. 2 у дужках вказано, на скільки значення даного класу більше за клас 1, де немає змін.

Одним з провідних факторів ерозії є кліматичні умови, а одним із провідних чинників – опади. Для уточнення індексу ерозійної небезпеки до аналізу додатково було залучено показник усередненої кількості опадів (*R*) за 117 років за гідрометеорологічними станціями (див. рис. 2, *a*). Найбільше середньорічне значення кількості опадів закономірно припадає на північ, захід та північний захід території України, що у фізико-географічному відношенні відповідає природним зонам хвойно-широколистяних та широколистяних лісів і гірському регіону Українських Карпат.

Українські Карпати є особливим регіоном у природному та геоекологічному відношенні [13], що пов'язано значною мірою з гірською природою цього регіону. Інтенсивність прояву багатьох природних процесів набуває значно більших масштабів порівняно із рівнинними територіями. Зокрема, це стосується розвитку процесів водної ерозії. Саме тут найбільш яскраво проявляється роль природної рослинності, у першу чергу лісової, як чинника ста-



**Рис. 4.** Оцінка ступеня ерозійної небезпеки території Карпатського регіону: *а* – за індексом *ER* з урахуванням кількості опадів (*R*) та рослинності за індексом *NDVI* (нормування); *б* – різниця між індексом *ER* з урахуванням кількості опадів (*R*) і рослинності за індексами *NDVI* та *ER*

**Таблиця 2.** Оцінка впливу кількості опадів (*R*) та рослинності за індексом *NDVI* на індекс *ER* для ерозійно небезпечних ділянок території Карпат

Номер класу	Вплив кількості опадів ( <i>R</i> ) та рослинності ( <i>NDVI</i> ) на індекс <i>ER</i>	Відсоток території дослідження, зайнятий класом
1	Відсутній	21,90
2	Слабкий позитивний (4–7 %)	41,31
3	Помірний позитивний (7–11 %)	20,52
4	Істотний позитивний (11–14 %)	11,08
5	Сильний позитивний (14–18 %)	2,85
6	Дуже сильний позитивний (>18 %)	0,87

білізації їх розвитку. Тому вирубки лісів на значних територіях [14] значно активізують поверхневий стік та мають непередбачувані наслідки, зокрема у вигляді катастрофічних повеней та паводків [15].

На рис. 3 наведено результати визначення індексу *ER* для території Карпатського регіону, як приклад однієї з найбільш ерозійно небезпечної ділянки за даними висот. Порівняння впливу кліматичних факторів (опадів) на індекс *ER* здійснювали таким чином: від значення індексу *ER* з урахуванням опадів *R*, розрахованого для Карпат, віднімали значення самого індексу *ER* (табл. 1).

Отже, з урахуванням опадів ерозійна небезпечність території Карпат підвищується майже на 100 %.

Враховуючи глобальні і регіональні кліматичні зміни, можливе збільшення кількості опадів, зокрема зростаючий ерозійний потенціал зливових опадів, потрібно пом'якшувати втрати ґрунту на різні проміжки часу як на сьогодні, так і в майбутньому.

Для пом'якшення слід враховувати ґрунтозахисну роль рослинності. Рослинний покрив значно зменшує або повністю припиняє розвиток ерозії ґрунтів. Густа рослинність перешкоджає прямому падінню дощових крапель та руйнуванню ґрунтових агрегатів. Частина води затримується кроною самих рослин, а густий травостій різко уповільнює швидкість стоку води. Таким чином, рослинність сприяє вбиранню води ґрунтом, захищає поверхню ґрунту від руйнування і уповільнює пересування води по поверхні. Рослинні залишки (стерня), залишені на поверхні ґрунту, сприяють утриманню і накопиченню снігу на полі, зменшенню глибини промерзання ґрунту. Вони перешкоджають розвитку водної та вітрової ерозії ґрунтів. Найбільш сприятливий вплив на зниження ерозії ґрунтів мають багаторічні трави. Їх травостій захищає ґрунти від впливу вітру і крапель дощу, поліпшує фізичні властивості ґрунту і підвищує його водонепроникність. Використання рослин для захисту ґрунтів від ерозії отримало назву фітомеліорація.

На рис. 2, б наведено карту розподілу індексу *NDVI*, що характеризує особливості рослинного покриву на території України за 2013 р. На карті коричнево-жовті кольори відповідають місцям, де рослинність відсутня або сильно розріджена, зелені кольори – місцям з рослинністю, темно-зелені кольори вказують на деревну рослинність.

На рис. 4 наведено остаточний результат використання індексу *ER* з урахуванням посиленої дії опадів на ерозійні процеси та рослинності, що пом'якшує ерозійну небезпеку. Для аналізу отриманого модифікованого індексу *ER* з урахуванням кількості опадів (*R*) та рослинності за індексом *NDVI* проведено його порівняння з індексом *ER*. Зіставлення проводилося не тільки у візуальній (див. рис. 4, б), а й у цифровій формі.

Аналіз даних табл. 2 показує, що із сукупним врахуванням розчленування рельєфу (*ER*), кліматичних факторів, опадів (*R*) та рослинності, індексу *NDVI* на прикладі регіону Карпат можливе ранжування ерозійно небезпечних територій та виявлення ділянок з істотним впливом рослинності (майже на 76,6 %). Дана методика експрес-оцінки ерозійно небезпечних ділянок ґрунтів на території України з використанням даних ДЗЗ із врахуванням кліматичних факторів та рослинності є ефективною не тільки для гірських територій, де є значний перепад висот, але й для рівнинної частини України.

У результаті проведеного дослідження виконано ранжування території України за ступенем небезпеки розвитку ерозійних процесів (градації). Супутникові спостереження дають можливість оперативно зафіксувати негативні процеси та явища, які відбуваються з ґрунтовим покривом, особливо на неконтрольованих у звичайний спосіб територіях, що має важливе значення для вжиття невідкладних агротехнічних заходів з призупинення та усунення ерозійних процесів, як і розрахунки індексу *ER* з урахуванням кількості опадів, наявності рослинності (індекс *NDVI*), на підставі яких визначаються потенційні території з найбільшою ерозійною небезпекою. Отримані результати можуть бути використані для експрес-оцінки ерозійної небезпеки будь-якої території, для якої побудована цифрова модель рельєфу.

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Деякі питання удосконалення управління в сфері використання та охорони земель сільськогосподарського призначення державної власності та розпорядження ними. Постанова Кабінету міністрів України від 7 червня 2017 р. № 413. *Урядовий кур'єр*. № 112, 17 червня 2017 р.

2. Попов М.А., Станкевич С.А., Козлова А.А. Дистанционная оценка риска деградации земель с использованием космических снимков и геопространственного моделирования. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2012. № 6. С. 100–104.
3. Горбатюк В.М., Клименко К.В. Організаційно-технологічні особливості здійснення моніторингу земель на регіональному рівні. *Геодезія, картографія і аерофотознімання.* 2007. Вип. 69. С. 150–156.
4. Трускавецький С.Р., Вяткін К.В. Земельна інформаційна система як геоінформаційно-технологічний інструмент моніторингу ґрунтів. *Агрохімія і ґрунтознавство.* 2015. Вип. 82. С. 14–19.
5. Зацерковний В.І. Застосування геоінформаційних систем у задачах ефективного землекористування. *Наук. пр. Техногенна безпека. Радиобіологія.* 2015. **261**, вип. 249. С.14–21.
6. Казаченко Л.М., Казаченко Д.А. ГІС-технології при виявленні деградаційних процесів ґрунтового покриву лісостепової частини Харківської області. *Вісн. Харків. нац. техн. ун-ту сільського господарства ім. Петра Василенка.* 2015. Вип. 156. С. 231–236.
7. Трускавецький С.Р., Вяткін К.В., Шерстюк О.І. Моніторинг ерозійних процесів за даними космічного знімання. *Агроекол. журн.* 2015. № 3. С. 60–65.
8. Швець О. Визначення потенційної небезпеки прояву ерозійних процесів за допомогою ГІС-технологій. *Сучасні досягнення геодез. науки та виробництва.* 2014. Вип. I. С. 137–140.
9. Светличный А.А. Пространственное геоинформационное моделирование и прогноз водной эрозии почв. *Пробл. безперервної географ. освіти і картографії.* 2013. Вип. 17. С. 44–47.
10. Медведев В.В., Лактіонова Т.М., Греков Л.Д. Типологія і оцінки небезпечних явищ у ґрунтовому покриві України. *Ґрунтознавство.* 2004. **5**, № 3–4. С. 13–23.
11. Палиенко В.П., Спица Р.А., Чеботарева Л.Е. Интегральная оценка интенсивности эрозийных процессов в речных бассейнах Украины. *Теоретические и прикладные проблемы современной географии: Материалы междунар. науч. конф. памяти академика Г.И. Швевса, 3–5 июня 2009 г.* Одесса: ВМВ, 2009. С.164–166.
12. Лялько В.І., Єлістратова Л.О., Апостолов О.А., Чехній В.М. Аналіз ґрунтово-ерозійних процесів в Україні на основі застосування даних дистанційного зондування Землі. *Вісн. НАН України.* 2017. № 10. С. 34–41.
13. Приходько М.М. Стан земель в регіоні Українських Карпат та їх екологічна безпека. *Укр. географ. журн.* 2012. № 2. С. 43–48.
14. Криницький Г., Третяк П. Стан лісів Українських Карпат, екологічні проблеми та перспективи. *Пр. Наук. тов-ва ім. Шевченка. Екол. зб.* 2003. **12**. С. 54–65.
15. Самойленко Л. І., Колос Л. М., Підгородецька Л. В., Ільєнко Т. В., Власова О. В. Інформаційна технологія моніторингу повеней з використанням даних ДЗЗ. *Космічна наука і технологія.* 2009. **15**, № 3. С. 50–55.

Надійшло до редакції 28.09.2017

## REFERENCES

1. Some issues of improvement of management in the field of use and protection of agricultural land of state ownership and disposal. (2017). Resolution of the Cabinet of Ministers of Ukraine dated June 7. 2017 No. 413. *Uriadovyi kurier*, No. 112, June 17 (in Ukrainian).
2. Popov, M. A., Stankievich, S. A. & Kozlova, A. A. (2012). Remote risk assessment of land degradation using satellite images and geospatial modeling. *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.*, No. 6, pp. 100-104 (in Russian).
3. Gorbatyuk, V. M. & Klimenko, K. V. (2007). Organizational-technological peculiarities of monitoring of land at the regional level. *Heodesziia, kartohrafiia i aeroznimannia*, 69, pp. 150-156 (in Ukrainian).
4. Truskavetsky, S. R. & Vyatkin, K. V. (2015). Land information system as a geoinformation and technology tool for soil monitoring. *Agrochemistry and soil science*. Iss. 82, pp. 14-19 (in Ukrainian).
5. Zatserkovniy V.I. (2015). The use of geographic information systems in tasks effective land use. *Naukovi pratsi. Tekhnogenna bezpeka. Radiobioloiiia*, 261, Iss. 249, pp. 14-21 (in Ukrainian).
6. Kazachenko, L. & Kazachenko, D. (2015). GIS-technologies in detecting degradation processes of the soil cover of the forest-steppe part of the Kharkiv region. *Visnyk Kharkivskoho nationalnoho tehnicnoho universytetu silskoho hospodarstva imeni Petra Vasylenka*, 156, pp. 231-236 (in Ukrainian).
7. Truskavetskiy, S., Vyatkin, K. & Sherstiuk, A. (2015). Monitoring of erosion processes according to the data of satellite observations. *Agroecol. j.*, No. 3, pp. 60-65 (in Ukrainian).
8. Shvets, O. (2014). Determination of the potential danger of manifestation erosion using GIS technology. *Suchasni dosiahnennia heodezychnoi nauky ta vyrobnytstva*, Iss. 1, pp. 137-140 (in Ukrainian).

9. Svetlichnyi, A. A. (2013). Spatial geoinformational modeling and forecast of soil water erosion. Problemy bezperevnoyi heohrafichnoyi osvity ta kartohrafiyi, Iss. 17, pp. 44-47 (in Russian).
10. Medvedev, V. V., Laktionova, T. M. & Grekov, L. D. (2004). The typology and estimation of dangerous phenomena in a soil cover of Ukraine. Gruntoznavstvo, 5, No. 3-4, pp. 13-23 (in Ukrainian).
11. Palienko, V. P., Spitsa, R. A. & Chebotareva, L. E. (2009, June). Integral estimation of intensity of erosion processes in river basins of Ukraine. Proceeding of the International Scientific Conference memory of academician G. I. Schwabs Theoretical and applied problems of modern geography (pp.164-166). Odessa: VMV (in Russian).
12. Lyalko, V. I., Elistratova, L. A., Apostolov, A. A. & Chekhniy, V. M. (2017). Analysis of soil erosion processes in Ukraine on the basis of remote sensing of the Earth. Visn. Nac. Akad. Nauk Ukr., No. 10, pp. 34-41 (in Ukrainian).
13. Prykhdoko, M. (2012). The state of the lands in Ukrainian Carpathians and their ecological safety. Ukr. Geograph. J., No. 2, pp. 43-48 (in Ukrainian).
14. Krynickiy, G. & Tretyak, P. (2003). The state of the Ukrainian Carpathians forests, ecological problems and prospects. Proc. Shevchenko Sci. Soc., 12, pp. 54-65 (in Ukrainian).
15. Samoilenko, L. I., Kolos, L. M., Pidgorodetska, L. V., Iliencko, T. V. & Vlasova, O. V. (2009). Information technology of flood monitoring with the use of remote sensing data. Space Sci. Technol., 15, No. 3, pp. 50-55 (in Ukrainian).

Received 28.09.2017

*В.І. Лялько<sup>1</sup>, Л.А. Єлистратова<sup>1</sup>, А.А. Апостолов<sup>1</sup>, А.Я. Ходоровський<sup>1</sup>, В.М. Чехній<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> ГУ “Научный центр аэрокосмических исследований Земли  
Института геологических наук НАН Украины”, Киев

<sup>2</sup> Институт географии НАН Украины, Киев  
E-mail: alex@casre.kiev.ua

#### ЕКСПРЕСС-ОЦЕНКА ЭРОЗИОННО ОПАСНЫХ УЧАСТКОВ ПОЧВЕННОГО ПОКРОВА НА ТЕРРИТОРИИ УКРАИНЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДАННЫХ ДИСТАНЦИОННОГО ЗОНДИРОВАНИЯ ЗЕМЛИ С УЧЕТОМ КЛИМАТИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ И РАСТИТЕЛЬНОСТИ

Разработан подход для экспресс-оценки территории по степени эрозионной опасности с использованием данных цифровой модели рельефа, климатических факторов и растительности. Проведена экспресс-оценка эрозионно опасных участков почвенного покрова на территории Украины по разработанной методике. Сделано ранжирование потенциально опасных участков по степени опасности.

**Ключевые слова:** эрозия почв, дистанционные методы, цифровая модель рельефа, осадки, NDVI.

*V.I. Lyalko<sup>1</sup>, L.O. Elistratova<sup>1</sup>, O.A. Apostolov<sup>1</sup>, A.Ya. Khodorovsky<sup>1</sup>, V.M. Czechniy<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Scientific Center for Aerospace Research of the Earth,  
Institute of Geological Sciences of the NAS of Ukraine, Kiev

<sup>2</sup> Institute of Geography of the NAS of Ukraine, Kiev  
E-mail: alex@casre.kiev.ua

#### EXPRESS-EVALUATION OF POTENTIALLY EROSIIVE SOILS ON THE TERRITORY OF UKRAINE, BY USING THE REMOTE SENSING DATA WITH CONSIDERATION OF CLIMATIC FACTORS AND VEGETATION

An approach to the express-evaluation of the degree of potential erosion of a territory is developed. The approach includes using the data from a digital model of relief, climatic factors, and vegetation. The express-evaluation of potentially erosive areas of the soil cover on the territory of Ukraine is carried out according to the developed methodology. The ranking of potentially hazardous areas according to the degree of danger has been carried out.

**Keywords:** soil erosion, remote sensing methods, digital model of relief, precipitation, NDVI.

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.03.095>

УДК 66.095.26-921: 66.095.26-922

**В.Ф. Кір'янчук<sup>1</sup>, З.І. Демчук<sup>2</sup>, І.Т. Тарнавчик<sup>2</sup>, К. Кінгслі<sup>2</sup>,  
А.М. Когут<sup>1</sup>, О.М. Шевчук<sup>1</sup>, С.А. Воронов<sup>1</sup>, А.С. Воронов<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Національний університет "Львівська політехніка"

<sup>2</sup> Державний університет Північної Дакоти, Фарго, США

E-mail: vasuluna411@ukr.net, stanislav.voronov@gmail.com

## **Кінетика та механізм реакцій вільнорадикальної полімеризації акрилових мономерів на основі тригліцеридів рослинних олій**

*Представлено членом-кореспондентом НАН України В.В. Шевченком*

*Через реакцію перестерифікації оливкової олії *N*-гідроксіетилакриламідом синтезовано новий акриловий мономер – акрилоїламіноетилолеат ("оливковий" мономер (ОМ)). Структуру ОМ та його гомополімеру підтверджено методами ІЧ та <sup>1</sup>Н ЯМР спектроскопії. Особливістю структури ОМ, на відміну від відомого акрилового мономера на основі тригліцеридів соєвої олії – акрилоїламіноетилсоєату ("соєвий" мономер (СМ)), який має в ацильному фрагменті жирної кислоти два подвійні зв'язки, є наявність лише одного подвійного зв'язку. Це зумовлює в процесі радикальної полімеризації ОМ одночасний перебіг реакцій росту макроланцюга та менш вираженої реакції передачі ланцюга порівняно з СМ, а також формування полі-ОМ з більшою молекулярною масою, ніж полі-СМ. Визначено порядки реакції за мономером та ініціатором, а також кінетичні особливості полімеризації для ОМ та СМ. Встановлено константи кополімеризації ( $r_1$ ,  $r_2$ ) зі стиролом та *Q-e* параметри для ОМ.*

**Ключові слова:** *оливкова олія, перестерифікація, мономери з рослинних олій, вільнорадикальна полімеризація.*

В останні роки гідрофобні мономери широко використовуються для одержання фарб, адгезивів, пластифікаторів, покриттів тощо [1]. Такі мономери були синтезовані через взаємодію жирних спиртів з акрилоїлхлоридом [2]. Особливу увагу привертають гідрофобні мономери на основі відновлюваної сировини, зокрема з рослинних олій. Так, *N*-гідроксіалкіламиди та метакрилатні гідрофобні мономери на їх основі були одержані через взаємодію тригліцеридів рослинних олій з аміноспиртами [3]. Через приєднання ліноленої кислоти до гліцидилметакрилату синтезовано гідрофобний метакрилатний мономер [4].

Оригінальний одностадійний метод синтезу акрилового мономера – акрилоїламіноетилсоєату (соєвий мономер (СМ)) через реакцію перестерифікації соєвої олії *N*-гідроксіетилакриламідом запропоновано в роботі [5]. Особливістю структури СМ є наявність у молекулі акрилової групи та двох подвійних зв'язків і, відповідно, алільних (рухомих) атомів водню в ацильному фрагменті жирної кислоти. Тому під час радикальної полімеризації СМ одночасно відбуваються реакції росту макроланцюга та передачі ланцюга за участю рухли-

© В.Ф. Кір'янчук, З.І. Демчук, І.Т. Тарнавчик, К. Кінгслі, А.М. Когут, О.М. Шевчук, С.А. Воронов, А.С. Воронов, 2018





том магнію і відганяли розчинник у вакуумі. Одержували 170 г мономера (вихід – 90 %).

Хімічну структуру синтезованого мономера підтверджували  $^1\text{H}$  ЯМР (Bruker, частота 400 МГц) та ІЧ спектроскопією (Thermo Scientific Nicolet 8700) (рис. 2). Мас-спектр мономера було отримано на мас-спектрометрі з високою роздільною здатністю Bruker Daltonics BioTOF.

**Гомополімеризація акрилоїламіноетил-олеату.** Синтез гомополімеру проводили вільнорадикальною полімеризацією мономера (1 моль/л) в толуолі за наявності ДАК (0,038 моль/л). Реакційну суміш продували аргоном при кімнатній температурі протягом 10 хв і витримували в діапазоні 70–85 °С протягом 4 год. Отриманий гомополімер очищали переосадженням у метанолі та сушили при кімнатній температурі до сталої маси. Середньочислову молекулярну масу ( $M_n$ ) гомополімеру визначали гель-проникною хроматографією (модульний хроматограф Waters Corporation, насос Waters 1515 HPLC, детектор показника заломлення Waters 2410, дві колонки 10 мкм PL-gelmixed-B, температура колонок 40 °С, розчинник – тетрагідрофуран).

**Кінетичні дослідження гомополімеризації акрилоїламіноетил-олеату.** Для визначення порядку реакції за ініціатором проводили полімеризацію з постійною кількістю мономера ( $[M] = 1$  моль/л) з різними концентраціями ініціатора ДАК ( $[I] = 0,02; 0,03; 0,038; 0,06$  моль/л) при 75 °С. Для кожної концентрації ініціатора визначали швидкість полімеризації ( $V_p$ , моль/(л·с)) на прямолінійній ділянці на кривій конверсія – час (до конверсії мономера 10–15 %). Конверсію мономерів визначали гравіметричним методом. Будували залежність  $\ln V_p$  від  $\ln C[I]$  і визначали тангенс кута нахилу одержаної прямої  $\alpha$ , який чисельно дорівнює порядку реакції за ініціатором [6].

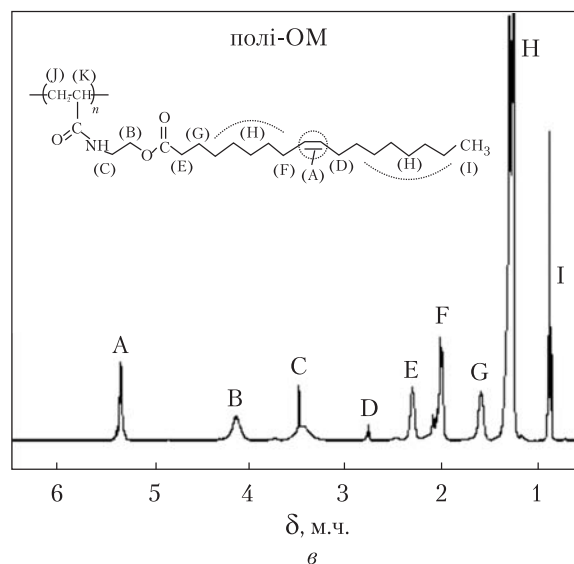
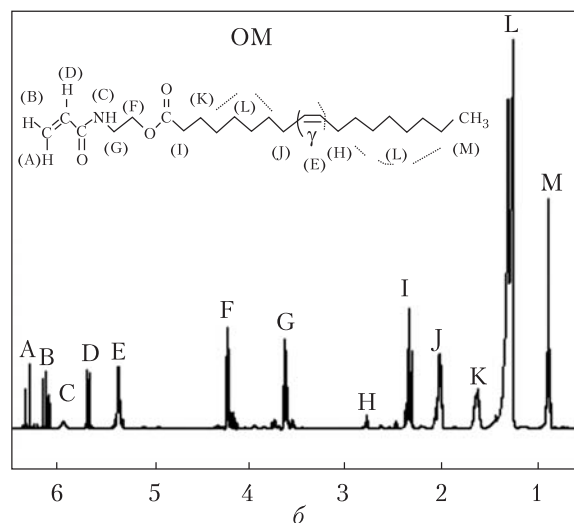
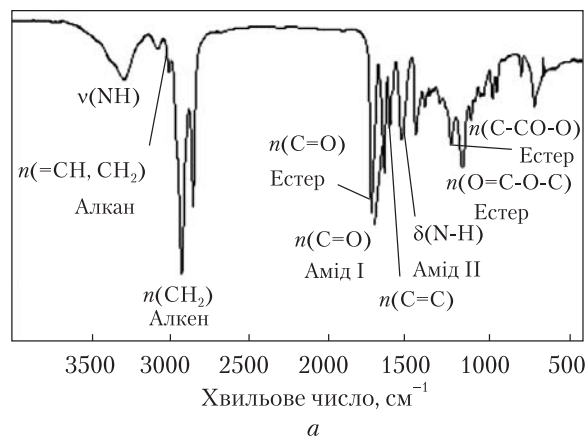


Рис. 2. ІЧ спектр мономера ОМ (а),  $^1\text{H}$  ЯМР спектри мономера ОМ (б) та гомополімеру (в) на основі ОМ

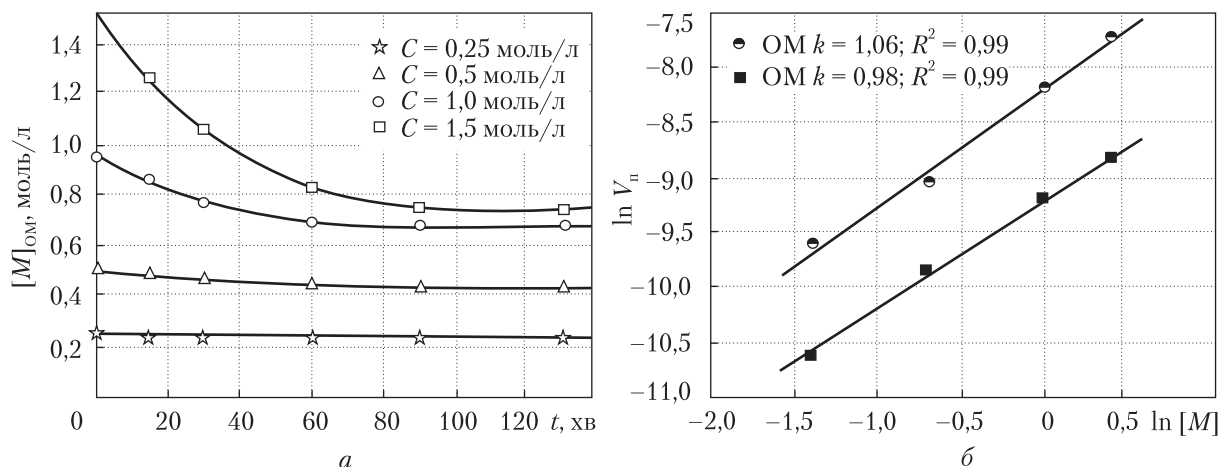


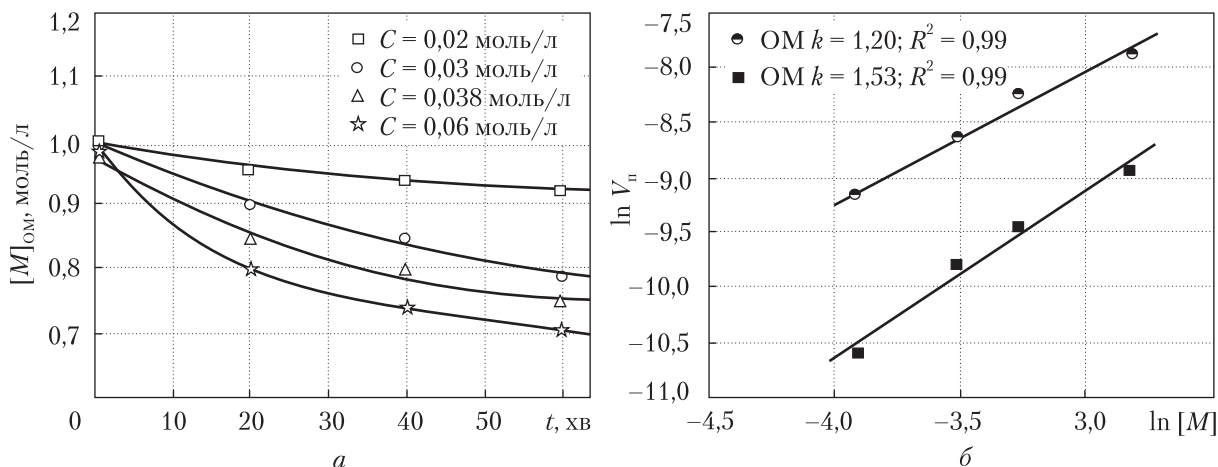
Рис. 3. Кінетика вільнорадикальної полімеризації ОМ, ініційованої ДАК (0,038 моль/л) при 75 °С (а), та залежності швидкості полімеризації від концентрації ОМ і СМ (б)

Для визначення порядку реакції за мономером проводили полімеризацію ОМ у толуолі з постійним сумарним об'ємом мономера та розчинника з різними кількостями мономера ( $[M] = 0,25; 0,5; 1,0; 1,5$  моль/л) і постійною концентрацією ініціатора ( $[I] = 0,038$  моль/л) в сумарному об'ємі при 75 °С. Для кожної концентрації мономера визначали швидкість полімеризації на прямолінійній ділянці на кривій конверсія — час (до конверсії мономера 10–15 %). Будували залежність  $\ln V_p$  від  $\ln [M]$  і визначали тангенс кута нахилу одержаної прямої  $\alpha$ , який чисельно дорівнює порядку реакції за мономером [6].

**Кополімеризація акрилоїламіноетилолеату.** Мономер (0,4–2 г), стирол (0,1–0,5 г) та ДАК (0,04 г, 0,038 М) розчиняли у 5 мл толуолу при перемішуванні. Реакційну суміш продували аргоном при кімнатній температурі протягом 10 хв та витримували при 60 °С протягом 2 год. Кополімеризацію проводили до конверсії мономерів 10–15 % (визначали гравіметрично). Отриманий кополімер виділяли та очищали переосадженням в метанол, висушували при кімнатній температурі в струмені азоту до сталої маси. Отримані кополімери ОМ та СМ зі стиролом добре розчинні в дихлорметані, хлороформі, етилацетаті, гептані, толуолі, діоксані та тетрагідрофурані, менш розчинні в ацетоні, диметилформаміді.

**Результати та обговорення.** З метою дослідження особливостей кінетики та механізму реакцій вільнорадикальної полімеризації акрилоїламіноетилолеату була встановлена його структура методами  $^1\text{H}$  ЯМР та ІЧ спектроскопії. Спектри  $^1\text{H}$  ЯМР та ІЧ спектроскопії акрилоїламіноетилолеату наведено на рис. 2.

Наявність у  $^1\text{H}$  ЯМР спектрі мономера ОМ характерних піків протонів при 6–6,6 м.ч. вказує на присутність акрилоїламідного фрагмента (протони акрилового подвійного зв'язку), а піки при 3,6 і 4,20 м.ч. відповідають протонам двох метиленових груп, розташованих між амідною та естерною групами. Піки від 0,8 до 2,8 м.ч. відповідають сигналам фрагментів жирних кислот. Наявність піків 5,3–5,44 м.ч. вказує на присутність воднів біля подвійного вуглець-вуглецевого зв'язку в ацильному залишку жирної кислоти. Піки 1,98–2,14 м.ч. вказують на присутність воднів у  $\alpha$ -положенні до подвійного зв'язку (алільних воднів), здатних до участі в реакції передачі лацюга. Поява в ІЧ спектрі сильних смуг поглинання NH



**Рис. 4.** Кінетика вільнорадикальної полімеризації ОМ (1 моль/л), ініційованої різними концентраціями ДАК при 75 °С (а), та залежності швидкості полімеризації ОМ і СМ від концентрації ініціатора (б)

при 3400–3200  $\text{cm}^{-1}$ , карбонілу (амід I) при 1670  $\text{cm}^{-1}$  і NH (амід II) при 1540  $\text{cm}^{-1}$  свідчить про приєднання ацильного залишку жирної кислоти до фрагментів акриламиду. Смуги поглинання при 1740, 1245 та 1180  $\text{cm}^{-1}$  підтверджують наявність естерної групи в молекулі ОМ. Смуги поглинання при 1665–1635  $\text{cm}^{-1}$  підтверджують наявність подвійного вуглець-вуглецевого зв'язку в ацильному залишку жирної кислоти.

Оскільки акрилоїламідний фрагмент забезпечує здатність даного мономера до ланцюгової радикальної полімеризації та формування лінійних макромолекул, то акрилоїламіноетилолеат можна віднести до класичних вінільних мономерів. Водночас наявність алільних воднів у ацильних залишках жирних кислот спричиняє перебіг реакцій передачі ланцюга та автоінгібування процесу. Тобто в реакціях вільнорадикальної полімеризації акрилоїламіноетилолеату, очевидно, одночасно відбуваються два процеси — ріст макроланцюга та передача ланцюга (алільного обриву).

З метою встановлення кінетичних особливостей та механізму реакцій вільнорадикальної гомополімеризації ОМ в порівнянні з гомополімеризацією СМ [7], були досліджені залежності швидкості його вільнорадикальної полімеризації  $V_p$  від концентрації мономера  $[M]$  та ініціатора  $[I]$  і визначені порядки реакції полімеризації за мономером та ініціатором (рис. 3).

Як випливає з рис. 3, швидкість полімеризації прямо пропорційна концентрації ОМ та СМ, тобто порядок реакції за мономерами близький до 1. Для визначення швидкості реакції полімеризації ОМ та порядку за ініціатором полімеризацію проводили з постійною концентрацією мономера ОМ ( $[M] = 1$  моль/л) та змінною концентрацією ініціатора процесу ДАК (рис. 4).

Видно, що для ОМ порядок реакції за ініціатором становить 1,20. Відомо, що для СМ порядок реакції за ініціатором дорівнює 1,53. Тобто порядки реакції за ініціатором для ОМ та СМ істотно відхиляються від найбільш характерного для реакції полімеризації вінільних мономерів значення (0,5), яке обумовлене бімолекулярним обривом ланцюгів. Таке відхилення порядків очевидно зумовлене специфічним механізмом реакції гомополімеризації

ОМ та СМ — одночасним перебігом реакцій росту макроланцюга та передачі ланцюга, чого не передбачає основне рівняння швидкості радикальної полімеризації. У випадку гомополімеризації ОМ і СМ швидкість реакції з точки зору формальної кінетики є функцією концентрацій реагуючих речовин (реагентів): (і) взаємодії частини первинних радикалів з акриловою групою мономера та (іі) взаємодії іншої частини первинних радикалів з алільними воднями фрагмента жирної кислоти мономера. Таким чином, у реакції гомополімеризації реагуючі речовини — це взаємодіюча частина первинних радикалів з подвійним (вінільним) зв'язком частини мономера (реакція росту,  $E_a \approx 25$  кДж/моль [8], бімолекулярний обрив, порядок за ініціатором 0,5) й інша частина первинних радикалів з іншою частиною мономера, яка зумовлює деградаційну передачу ланцюга та алільний обрив (реакція передачі ланцюга,  $E_a \approx 25$  кДж/моль [8], мономолекулярний обрив, автоінгібування, порядок за ініціатором близько 1).

Тоді загальну швидкість полімеризації можна записати у вигляді

$$V_{\text{п}} = k ([M_{-}] [M_1^{\bullet}])^{0,5} ([M_{\text{C-H}}] [M_2^{\bullet}])^1,$$

де  $[M_{-}]$  — концентрація мономера, яка бере участь у полімеризації;  $[M_1^{\bullet}]$  — концентрація радикалів, які реагують з вінільним зв'язком мономера (ріст ланцюга);  $[M_{\text{C-H}}]$  — концентрація мономера, яка бере участь у реакції передачі ланцюга;  $[M_2^{\bullet}]$  — концентрація радикалів, які реагують з алільними атомами водню мономера (передача ланцюга).

Очевидно, що під час взаємодії  $M_1^{\bullet}$  з мономером  $M_{-}$  утворюються радикали  $M_n^{\bullet}$ , а у разі взаємодії  $M_2^{\bullet}$  з мономером  $M_{\text{C-H}}$  утворюються радикали  $M_{\text{C}}^{\bullet}$ . Радикали  $M_n^{\bullet}$  і  $M_{\text{C}}^{\bullet}$  можна розглядати як реагенти в гомополімеризації ОМ і СМ. Тоді залежність швидкості гомополімеризації від концентрації реагентів описується рівнянням

$$V_{\text{п}} = k [M_n^{\bullet}]^{0,5} [M_{\text{C}}^{\bullet}]^{-1,0} = k [M^{\bullet}]^{-1,5}.$$

Після логарифмування рівняння перетворюється в лінійну залежність  $\lg V_{\text{п}}$  від  $\lg [M^{\bullet}]$ , тобто

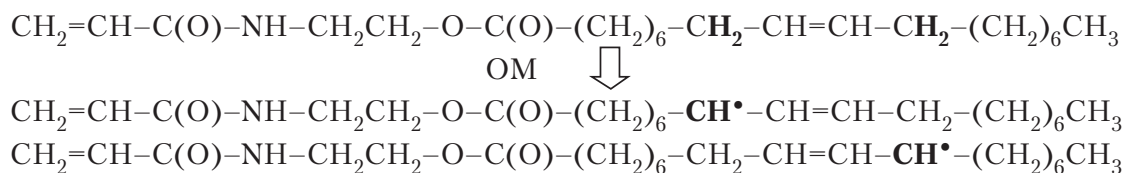
$$\lg V_{\text{п}} = \lg k + 1,5 \lg [M^{\bullet}].$$

Таке рівняння підтверджується одержаними експериментальними даними (див. рис. 4, б) порядку реакції за ініціатором (1,20 для ОМ і 1,53 для СМ). Можна зробити висновок, що для обох досліджених мономерів порядок реакції за ініціатором визначається їх будовою і зростає зі збільшенням ступеня ненасиченості мономера. Це свідчить про вплив кількості алільних атомів водню в складі молекули мономера на загальний порядок реакції за ініціатором.

Важливо, що в полімерах на основі ОМ та СМ кількість протонів А (див. рис. 2, в) подвійних зв'язків у фрагментах жирних кислот практично не змінюється порівняно зі структурою самих мономерів (протони Е, див. рис. 2, б) (1,97 Н у полі-ОМ; 1,98 Н в ОМ та 2,73 Н у полі-СМ; 2,79 Н в СМ). Кількість таких протонів у "жирних" подвійних зв'язках гомополімерів зменшується лише на 0,5–2 % порівняно з мономерами, що відповідає межах похибки. Ці дані переконливо показують, що практично всі подвійні зв'язки у фрагментах жирних кислот у ОМ та СМ зберігаються під час полімеризації.

З використанням  $^1\text{H}$  ЯМР спектроскопії було встановлено, що в молекулі СМ міститься в середньому п'ять алільних атомів водню, а в молекулі ОМ — у середньому чотири та-

ких атоми. Утворення стабільних радикалів через "деградаційну передачу ланцюга" для ОМ можна зобразити як



Встановлено, що швидкість процесу гомополімеризації ОМ та СМ визначається хімічною структурою мономера. Для менш ненасиченого ОМ гомополімеризація при 70–80 °С відбувається з більшою швидкістю  $(12,2 \div 45,3) \cdot 10^{-5}$  моль/(л·с), ніж для більш ненасиченого СМ  $(4,3 \div 11,3) \cdot 10^{-5}$  моль/(л·с). При цьому середньочисельна молекулярна маса для гомополімеру на основі ОМ становить 16800–23200, а для полімеру із СМ – 13600–14300. Це пояснюється тим, що константа передачі ланцюга на мономер, яка визначена нами за допомогою залежності швидкості полімеризації від оберненого ступеня полімеризації за методикою [9], становить для ОМ 0,015, тоді як для СМ вона дорівнює 0,026 [7]. Це пояснюється наявністю меншої кількості алільних воднів у структурі ОМ порівняно з СМ і, відповідно, менш істотним впливом реакцій алільного обриву на полімеризацію ОМ.

Відносна активність мономерів  $r_1$  та  $r_2$  для кополімеризації ОМ із стиролом була визначена з миттєвого складу кополімеру (за умов низької конверсії мономера 5–10 %, за допомогою  $^1\text{H}$  ЯМР спектроскопії) за методом Файнмана–Росса [10, 11]. З використанням параметрів  $Q-e$  для стиролу ( $Q = 1$  і  $e = -0,8$ ) [12] та експериментальних значень констант кополімеризації  $r_1 = 0,39 \pm 0,05$  і  $r_2 = 1,19 \pm 0,28$  для пари мономерів ОМ–стирол було обчислено  $Q-e$  параметри для ОМ. Отримані результати показують, що значення  $Q$  і  $e$  для ОМ та СМ подібні і становлять відповідно:  $Q = 0,42 \pm 0,05$ ;  $e = 0,09 \pm 0,08$  та  $Q = 0,41 \pm 0,01$ ;  $e = 0,18 \pm 0,06$ . Визначені значення  $Q-e$  параметрів для ОМ та СМ можуть бути використані для оцінки реакційної здатності комономерів під час синтезу нових кополімерів. Такі кополімери можуть використовуватися як поверхнево-активні речовини, емульгатори, адгезиви, модифікатори міжфазних поверхонь тощо.

Таким чином, через реакцію перестерифікації оливкової олії *N*-гідроксіетилакриламідом синтезовано новий акриловий мономер акрилоїламіноетилолеат (ОМ). Дослідження реакцій вільнорадикальної полімеризації ОМ в порівнянні з мономером на основі соєвої олії (акрилоїламіноетилолеат, СМ) показало, що порядки реакції за ініціатором для ОМ та СМ становлять 1,20 та 1,53, що пояснюється одночасним перебігом реакцій росту макроланцюга та передачі ланцюга. Визначено відносну активність мономерів  $r_1$  та  $r_2$  для кополімеризації ОМ із стиролом та  $Q-e$  параметри. Одержані значення  $Q$  і  $e$  для ОМ та СМ подібні та становлять відповідно:  $Q = 0,42 \pm 0,05$ ;  $e = 0,09 \pm 0,08$  та  $Q = 0,41 \pm 0,01$ ;  $e = 0,18 \pm 0,06$ , що пов'язано з наявністю в структурі їх молекул одного і того ж акрилоїламідного фрагмента, який визначає реакційну здатність цих мономерів.

*Автори висловлюють вдячність United Soybean Board, North Dakota Department of Commerce, National Science Foundation ND EPSCoR за фінансову підтримку проведених досліджень.*

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Havelka K. O., McCormick C. L. Specialty monomers and polymers: synthesis, properties, and applications. 1st ed. Washington, D.C.: American Chemical Society. 2000. 254 p.
2. Chen F.-B., Bufkin B.G. Crosslinkable emulsion polymers by autoxidation. I. Reactivity ratios. *J. Appl. Polym. Sci.* 1985. **30**, Iss. 12, P. 4571–4582.
3. Yuan L., Wang Z., Trenor N. M., Tang C. Robust amidation transformation of plant oils into fatty derivatives for sustainable monomers and polymers. *Macromolecules*. 2015. **48**, Iss. 5. P. 1320–1328. doi: <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.5b00091>
4. Moreno M., Miranda J. I., Goikoetxea M., Barandiaran M. Sustainable polymer latexes based on linoleic acid for coatings applications. *Prog. Org. Coat.* 2014. **77**, Iss. 11. P. 1709–1714.
5. Tarnavchuk I., Popadyuk A., Popadyuk N., Voronov A. Synthesis and free radical copolymerization of a vinyl monomer from soybean oil. *ACS Sustainable Chem. Eng.* 2015. **3**, Iss. 7. P. 1618–1622. doi: <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.5b00312>
6. Торопцева А.М., Белгородская К.В., Бондаренко В.М. Лабораторный практикум по химии и технологии высокомолекулярных соединений. Ленинград: Химия, 1972. 416 с.
7. Demchuk Z., Shevchuk O., Tarnavchuk I., Kirianchuk V., Kohut A., Voronov S., Voronov A. Free radical polymerization behavior of the vinyl monomers from plant oil triglycerides. *ACS Sustainable Chem. Eng.* 2016. **4**, Iss. 12. P. 6974–6980. doi: <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.6b01890>
8. Бреслер, С.Е., Ерусалимский Б.Л. Физика и химия макромолекул. Москва, Ленинград: Наука, 1965. 509 с.
9. Kukulj D., Davis T. P., Gilbert R. G. Chain Transfer to Monomer in the Free-Radical Polymerizations of Methyl Methacrylate, Styrene, and  $\alpha$ -Methylstyrene. *Macromolecules*. 1998. **31**, Iss.4. P. 994–999. doi: <https://doi.org/10.1021/ma971323r>
10. Odian G. Principles of Polymerization, 4th ed. New York: Wiley, 2004. p. 832.
11. Vilela C., Rua R., Silvestre A.J.D., Gandini A. Polymers and copolymers from fatty acid-based monomers. *Ind. Crops Prod.* 2010. **32**, Iss. 2. P. 97–104.
12. Carraher C. E. Introduction to Polymer Chemistry, 2nd ed. Boca Raton, FL.: Taylor & Francis, 2010. 534 p.

Надійшло до редакції 07.12.2017

REFERENCES

1. Havelka, K. O. & McCormick, C. L. (2000). Specialty monomers and polymers: synthesis, properties, and applications. 1st ed. Washington, D.C.: American Chemical Society.
2. Chen, F. B. & Bufkin, G. (1985). Crosslinkable emulsion polymers by autoxidation. I. Reactivity ratios. *J. Appl. Polym. Sci.*, 30, Iss. 12, pp. 4571-4582.
3. Yuan, L., Wang, Z., Trenor, N. M. & Tang, C. (2015). Robust amidation transformation of plant oils into fatty derivatives for sustainable monomers and polymers. *Macromolecules*, 48, Iss. 5, pp. 1320-1328. doi: <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.5b00091>
4. Moreno, M., Miranda, J. I., Goikoetxea, M. & Barandiaran, M. (2014). Sustainable polymer latexes based on linoleic acid for coatings applications. *Prog. Org. Coat.*, 77, Iss. 11, pp. 1709-1714.
5. Tarnavchuk, I., Popadyuk, A., Popadyuk, N. & Voronov, A. (2015). Synthesis and free radical copolymerization of a vinyl monomer from soybean oil. *ACS Sustainable Chem. Eng.*, 3, Iss. 7, pp. 1618-1622. doi: <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.5b00312>
6. Toropseva, A. M., Belogorodskaya, K. V & Bondarenko, V. M. (1972). Laboratory workshop on chemistry and technology of high-molecular compounds. Leningrad: Khimiya (in Russian).
7. Demchuk, Z., Shevchuk, O., Tarnavchuk, I., Kirianchuk, V., Kohut, A., Voronov, S. & Voronov, A. (2016). Free radical polymerization behavior of the vinyl monomers from plant oil triglycerides. *ACS Sustainable Chem. Eng.*, 4, Iss. 12, pp. 6974-6980. doi: <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.6b01890>
8. Bresler, S. E. & Erusalimsky, B. L. (1965). Physics and chemistry of macromolecules. Moskwa, Leningrad: Nauka (in Russian).
9. Kukulj, D., Davis, T. P. & Gilbert, R. G. (1998). Chain transfer to monomer in the free-radical polymerizations of methyl methacrylate, styrene, and  $\alpha$ -methylstyrene. *Macromolecules*. 31, Iss.4, pp. 994-999. doi: <https://doi.org/10.1021/ma971323r>

10. Odian, G. (1991). Principles of Polymerization. New York: Wiley.
11. Vilela, C., Rua, R., Silvestre, A. J. D. & Gandini, A. (2010). Polymers and copolymers from fatty acid-based monomers. Ind. Crops Prod., 32, Iss. 2, pp. 97-104.
12. Carraher, C. E. (2010). Introduction to polymer chemistry, 2nd ed. Boca Raton, FL: Taylor & Francis.

Received 07.12.2017

*В.Ф. Кирьянчук*<sup>1</sup>, *З.И. Демчук*<sup>2</sup>, *И.Т. Тарнавчик*<sup>2</sup>, *К. Кингсли*<sup>2</sup>,  
*А.М. Козут*<sup>1</sup>, *А.Н. Шевчук*<sup>1</sup>, *С.А. Воронов*<sup>1</sup>, *А.С. Воронов*<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Национальный университет "Львовская политехника"

<sup>2</sup> Государственный университет Северной Дакоты, Фарго, США

E-mail: vasuluna411@ukr.net, stanislav.voronov@gmail.com

#### КИНЕТИКА И МЕХАНИЗМ РЕАКЦИЙ СВОБОДНОРАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ АКРИЛОВЫХ МОНОМЕРОВ НА ОСНОВЕ ТРИГЛИЦЕРИДОВ РАСТИТЕЛЬНЫХ МАСЕЛ

С использованием переэстерификации оливкового масла с *N*-гидроксиэтилакриламидом синтезирован новый акриловый мономер — акрилоиламиноэтилолеат ("оливковый" мономер (ОМ)). Структура ОМ и его гомополимера подтверждена методами ИК и <sup>1</sup>H ЯМР спектроскопии. Особенностью структуры ОМ, в отличие от известного акрилового мономера на основе триглицеридов соевого масла — акрилоиламиноэтилсоята ("соевый" мономер (СМ)), который имеет в ацильном фрагменте жирной кислоты две двойные связи, является наличие только одной двойной связи. Это обуславливает при радикальной полимеризации ОМ одновременное протекание реакций роста макроцепи и менее выраженной реакции передачи цепи по сравнению с СМ, а также формирование поли-ОМ с большей молекулярной массой, чем поли-СМ. Определены порядки реакции по мономеру и инициатору, а также кинетические особенности полимеризации ОМ и СМ. Определены константы сополимеризации ( $r_1, r_2$ ) со стиролом и *Q-e* параметры ОМ.

**Ключевые слова:** оливковое масло, перестерификация, мономеры из растительных масел, свободнорадикальная полимеризация.

*V.F. Kirianchuk*<sup>1</sup>, *Z.I. Demchuk*<sup>2</sup>, *I.T. Tarnavchyk*<sup>2</sup>, *K. Kingsley*<sup>2</sup>,  
*A.M. Kohut*<sup>1</sup>, *O.M. Shevchuk*<sup>1</sup>, *S.A. Voronov*<sup>1</sup>, *A.S. Voronov*<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Lviv Polytechnic National University

<sup>2</sup> North Dakota State University, Fargo, USA

E-mail: vasuluna411@ukr.net, stanislav.voronov@gmail.com

#### KINETICS AND MECHANISM OF FREE-RADICAL POLYMERIZATION REACTION OF ACRYLIC MONOMERS BASED ON TRIGLYCERIDES OF PLANT OILS

A new acrylic monomer (acryloylamino)ethyl oleate ("olive" monomer, OM) is synthesized, by using the transesterification of olive oil with *N*-(hydroxyethyl)acrylamide. The structures of OM and its homopolymer are confirmed, by using FTIR and <sup>1</sup>H NMR-spectroscopy. The special feature of the structure of OM is the presence of only one double bond, in contrast to the known acrylic monomer based on the triglycerides of soybean oil, (acryloylamino)ethyl soyate ("soybean monomer", SM), which has two double bonds in the acyl fragment of the fatty acid. In the radical polymerization of OM, this leads to the simultaneous chain growth reaction and a less pronounced chain transfer reaction, as compared with SM, as well as to the formation of poly-OM with a higher molecular weight than poly-SM. The reaction orders with respect to the monomer and the initiator, as well as kinetic peculiarities for the polymerization of OM and SM, are determined. Monomer reactivity ratios ( $r_1, r_2$ ) for the copolymerization of the newly synthesized olive oil-based acrylic monomer with styrene, as well as the *Q-e* values for OM, are determined.

**Keywords:** olive oil, transesterification, monomers from vegetable oils, free radical polymerization.

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.03.104>

УДК 546.43'65'824 + 548.312.3

Ю.О. Тітов<sup>1</sup>, Н.М. Білявина<sup>1</sup>, М.С. Слободяник<sup>1</sup>, М.В. Тимошенко<sup>1</sup>, В.В. Чумак<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Київський національний університет ім. Тараса Шевченка

<sup>2</sup>Житомирський державний університет ім. Івана Франка

E-mail: tit@univ.kiev.ua

## Вплив ізовалентного заміщення атомів лантану в $\text{BaLa}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$ на будову його шаруватої перовськітоподібної структури

Представлено членом-кореспондентом НАН України М.С. Слободяником

Встановлено умови заміщення атомів La на атоми Nd у шаруватій перовськітоподібній структурі (ШПС) титанату  $\text{BaLa}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$ . Методом рентгенівської дифракції порошку визначено ШПС фази  $\text{BaLa}_{2,5}\text{Nd}_{1,5}\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  зі ступенем заміщення, близьким до максимального. Аналіз будови ШПС  $\text{BaLa}_{2,5}\text{Nd}_{1,5}\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  показав, що входження атомів Nd в ШПС  $\text{BaLa}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  призводить до збільшення ступеня деформації міжблочних поліедрів  $(\text{Ba},\text{Ln})\text{O}_{12}$  та зменшення довжини міжблочних відстаней  $(\text{Ba},\text{Ln})1 - 3\text{O}1$ . Обидва фактори дестабілізують ШПС і обмежують область існування твердих розчинів  $\text{BaLa}_{4-x}\text{Nd}_x\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  значенням  $x \leq 1,55$ .

**Ключові слова:** титанат  $\text{BaLa}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$ , шарувата перовськітоподібна структура, порошкова рентгенівська дифракція.

Наявність у титанатів  $\text{A}^{\text{II}}\text{La}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  ( $\text{A}^{\text{II}} = \text{Ba}, \text{Sr}, \text{Ca}$ ) з шаруватою перовськітоподібною структурою (ШПС) комплексу цінних діелектричних властивостей [1–5] дає підставу віднести їх до перспективних матеріалів мікрохвильової техніки. Зокрема, як показано в [5], для  $\text{A}^{\text{II}}\text{La}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  ( $\text{A}^{\text{II}} = \text{Ba}, \text{Sr}, \text{Ca}$ ) значення  $Q \cdot f$  та  $\epsilon_r$  знаходяться в діапазонах 16222–50215 ГГц і 44,7–49,1 відповідно, а температурний коефіцієнт резонансної частоти  $\tau_f$  — у межах від –13 до –25 ppm/°C.

Одним із шляхів регулювання характеристик оксидних сполук є ізоморфні заміщення атомів у їх структурі. Проте до цього часу синтезовані лише лантанвмісні титанати  $\text{A}^{\text{II}}\text{La}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$ , що обмежує встановлення зв'язків склад — будова ШПС, без знання яких неможливий синтез нових матеріалів на основі  $\text{A}^{\text{II}}\text{La}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$ .

Мета даної роботи — дослідження впливу ізовалентного заміщення атомів лантану в титанаті  $\text{BaLa}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  по типу  $\text{BaLa}_{4-x}\text{Nd}_x\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  на будову ШПС.

Синтез зразків  $\text{BaLa}_{4-x}\text{Nd}_x\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  проведено термообробкою при 1570 К шихти спільно осаджених гідроксикарбонатів за методикою, описаною в [6]. Як вихідні використані водні розчини  $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ ,  $\text{La}(\text{NO}_3)_3$ ,  $\text{Nd}(\text{NO}_3)_3$  та  $\text{TiCl}_4$  марок „хч”.

Кристалічна структура  $\text{BaLa}_{4-x}\text{Nd}_x\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  визначена методом Рітвельда. Рентгенівські дифракційні спектри полікристалічних зразків записано на дифрактометрі Shimadzu XRD-

© Ю.О.Тітов, Н.М.Білявина, М.С.Слободяник, М.В. Тимошенко, В.В.Чумак, 2018



6000 у дискретному режимі (крок сканування  $0,02^\circ$ , експозиція в точці 7 с, кути  $2\theta = 18-83^\circ$ ) на мідному фільтрованому (дугувий графітовий монохроматор перед лічильником)  $CuK_\alpha$  випромінюванні. Початкова обробка дифрактограм, а також структурні розрахунки проведено з використанням апаратно-програмного комплексу [7].

Результати рентгенівського дослідження кристалічних продуктів термообробки шихти СОГ із співвідношеннями  $Ba:La:Nd:Ti = 1:(4-x):x:4$  показали, що фази  $BaLa_{4-x}Nd_xTi_4O_{15}$  з ШПС існують при  $0 \leq x \leq 1,55$  (рис. 1). Характер залежності об'ємів елементарних комірок фаз  $BaLa_{4-x}Nd_xTi_4O_{15}$  із ШПС від ступеня заміщення атомів лантану відповідає закону Вегарда, що дає підставу розглядати їх як обмежений ряд твердих розчинів. З перевищенням межі ізоморфного заміщення атомів лантану відбувається розклад фаз з ШПС за схемою



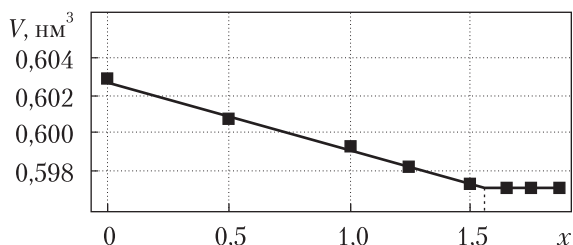
Виходячи з встановлених умов існування фаз з ШПС в системі  $BaLa_{4-x}Nd_xTi_4O_{15}$ , для вирішення поставленої задачі нами було проведено визначення будови ШПС для фази  $BaLa_{2,5}Nd_{1,5}Ti_4O_{15}$  зі ступенем заміщення атомів лантану ( $x = 1,5$ ), близьким до максимально можливого ( $x = 1,55$ ).

Індексування дифрактограм одержаного термообробкою шихти спільно осаджених гідроксикарбонатів  $BaLa_{2,5}Nd_{1,5}Ti_4O_{15}$  показало, що вони задовільно індексуються в тригональній сингонії. Систематика погасань відбиттів, а також нелінійно-оптичні характеристики вказують на належність кристалічної структури  $BaLa_{2,5}Nd_{1,5}Ti_4O_{15}$  до центросиметричної просторової групи  $P-3c1$ .

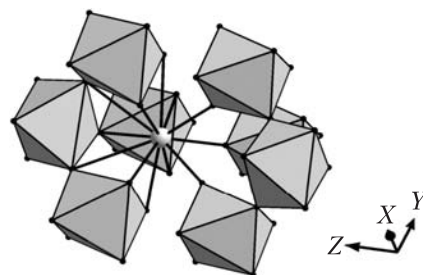
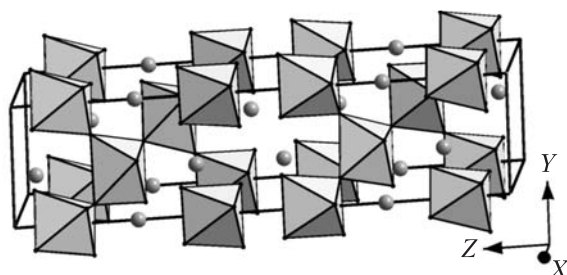
Первинну оцінку координат атомів для початкової моделі ШПС фази  $BaLa_{2,5}Nd_{1,5}Ti_4O_{15}$  проведено за структурними даними для титанату  $BaLa_4Ti_4O_{15}$  (пр. гр.  $P-3c1$ ) [8]. Близькість факторів атомного розсіювання атомів Ba та La і Nd унеможливило однозначне визначення способу їх розміщення в перовськітоподібних блоках ШПС  $BaLa_{2,5}Nd_{1,5}Ti_4O_{15}$ , тому уточнення її структури проведено в припущенні статистичного розподілу атомів Ba та La і Nd по позиціях у центрі (2a), у проміжній позиції (4d) та на краю блока (4d) (табл. 1). Зіставлення експериментальних і розрахованих для такої моделі структури інтенсивностей показало їх задовільну збіжність. Результати уточнення координатних та теплових параметрів ШПС  $BaLa_{2,5}Nd_{1,5}Ti_4O_{15}$ , а також дифракційні дані наведено в табл. 1, 2 та на рис. 2, 3.

Кристалічна структура  $BaLa_{2,5}Nd_{1,5}Ti_4O_{15}$  побудована з двовимірних (нескінченних у напрямках осей X і Y) перовськітоподібних блоків завтовшки в чотири шари, з'єднаних вершинами октаєдрів  $TiO_6$  (див. рис. 2). Одна п'ята октаєдричних позицій у перовськітоподібному блоці вакантна. Безпосередній зв'язок між зовнішньоблочними октаєдрами  $TiO_6$  сусідніх перовськітоподібних блоків у ШПС  $BaLa_{2,5}Nd_{1,5}Ti_4O_{15}$  відсутній. Блоки розділені шаром деформованих кубооктаєдрів  $(Ba,La,Nd)1O_{12}$  і утримуються разом за допомогою

**Рис. 1.** Залежність об'єму елементарних комірок фаз із ШПС складу  $BaLa_{4-x}Nd_xTi_4O_{15}$  від ступеня заміщення атомів лантану (значення  $x$ )



зв'язків — О — (Ba,La,Nd)1 — О —. Таке розташування кубооктаедра (Ba,La,Nd)1O<sub>12</sub> обумовлює його найбільший ступінь деформації порівняно з внутрішньоблочними поліедрами (Ba,La,Nd)2O<sub>12</sub> і (Ba,La,Nd)3O<sub>12</sub> в ШПС BaLa<sub>2,5</sub>Nd<sub>1,5</sub>Ti<sub>4</sub>O<sub>15</sub> (див. табл. 2). З дванадцяти атомів кисню поліедра (Ba,La,Nd)1O<sub>12</sub> дев'ять (шість O1 та три O2) належать до того ж блока, що і атоми (Ba,La,Nd)1, а три атоми кисню (O1) — до сусіднього блока (див. рис. 3). Координаційний поліедр внутрішньоблочних атомів (Ba,La,Nd)2 і (Ba,La,Nd)3 являє собою деформований кубооктаедр (див. табл. 2). Згідно з даними [8], в ШПС BaLa<sub>4</sub>Ti<sub>4</sub>O<sub>15</sub> має місце впорядкована локалізація великих атомів барію лише у зовнішньоблочних позиціях типу 4d, чим і обумовлений найбільший розмір поліедрів (Ba,La)1O<sub>12</sub>. Враховуючи ізоструктурність BaLa<sub>4</sub>Ti<sub>4</sub>O<sub>15</sub> та BaLa<sub>2,5</sub>Nd<sub>1,5</sub>Ti<sub>4</sub>O<sub>15</sub>, можна припустити аналогічний розподіл атомів Ba та La з Nd в ШПС останнього. На користь цього припущення свідчить найбільше значен-



**Рис. 2.** Кристалічна структура BaLa<sub>2,5</sub>Nd<sub>1,5</sub>Ti<sub>4</sub>O<sub>15</sub> у вигляді октаедрів TiO<sub>6</sub> та атомів Ba, La, Nd (кружечки)

**Рис. 3.** Будова міжблочної границі в ШПС BaLa<sub>2,5</sub>Nd<sub>1,5</sub>Ti<sub>4</sub>O<sub>15</sub> у вигляді октаедрів TiO<sub>6</sub> та атомів Ba, La, Nd (сірий кружечок)

Таблиця 1. Структурні дані BaLa<sub>2,5</sub>Nd<sub>1,5</sub>Ti<sub>4</sub>O<sub>15</sub>

Позиція	Атом	Заповнення	X	Y	Z
4d	A1	0,2Ba + 0,8Ln	0,66667	0,33333	0,4635(3)
4d	A2	0,2Ba + 0,8Ln	0,33333	0,66667	0,3592(2)
2a	A3	0,2Ba + 0,8Ln	0	0	0,25
4c	Ti1	1	0	0	0,4115(3)
4d	Ti2	1	0,66667	0,33333	0,3027(2)
12g	O1	1	0,856(3)	0,195(2)	0,547(3)
12g	O2	1	0,295(2)	0,093(2)	0,344(2)
6f	O3	1	0,513(2)	0	0,25
Просторова група			P-3c1 (№ 165)		
Періоди елементарної комірки, нм			a = 0,55499(5), c = 2,2386(2)		
Незалежні відбиття			138		
Загальний ізотропний В фактор, нм <sup>2</sup>			0,47(4) · 10 <sup>-2</sup>		
Параметр текстури			τ = 0,83(1), вісь текстури [001]		
Фактор недостовірності			R <sub>w</sub> = 0,046		

ня середньої довжини відстані  $((Ba,La,Nd)1 - O)_{\text{сеп}}$  серед таких для міжблочних поліедрів  $(Ba,La,Nd)O_{12}$  в ШПС  $BaLa_{2,5}Nd_{1,5}Ti_4O_{15}$  (див. табл. 2).

Аналіз кристалографічних характеристик фази  $BaLa_{2,5}Nd_{1,5}Ti_4O_{15}$  зі ступенем заміщення атомів лантану, близьким до максимального, та незаміщеного титанату  $BaLa_4Ti_4O_{15}$  показав, що входження в А-позицію ШПС титанату  $BaLa_4Ti_4O_{15}$  менших, ніж атом лантану, атомів неодиму зумовлює такі зміни в її будові:

- значно скорочується довжина міжблочних зв'язків  $(Ba,Ln)1 - 3O1$ ;
- істотно зростає ступінь деформації міжблочних поліедрів  $(Ba,Ln)1O_{12}$  (див. табл. 2).

Зменшення відстані між перовськітоподібними блоками наближає будову двовимірної ШПС до будови тривимірного, термодинамічно більш стабільного перовськіту, а збільшення ступеня деформації міжблочних поліедрів  $(Ba,La,Nd)1O_{12}$  призводить до зростання на-

Таблиця 2. Міжатомні відстані (нм) і ступінь деформації ( $\Delta$ ) поліедрів  $(Ba,Ln)O_{12}$  та  $TiO_6$  в кристалічних структурах  $BaLa_{2,5}Nd_{1,5}Ti_4O_{15}$  та  $BaLa_4Ti_4O_{15}$  [8]

$BaLa_{2,5}Nd_{1,5}Ti_4O_{15}$		$BaLa_4Ti_4O_{15}$ [8]	
Відстані	$d$ , нм	Відстані	$d$ , нм
$(Ba,La,Nd)1 - 3O1$	0,245(2)*	$(Ba,La)1 - 3O1$	0,258
$(Ba,La,Nd)1 - 3O1$	0,264(2)	$(Ba,La)1 - 3O1$	0,264*
$(Ba,La,Nd)1 - 3O1$	0,293(3)	$(Ba,La)1 - 3O1$	0,307
$(Ba,La,Nd)1 - 3O2$	0,323(3)	$(Ba,La)1 - 3O2$	0,311
$((Ba,La,Nd)1 - O)_{\text{сеп}}$	0,281	$((Ba,La)1 - O)_{\text{сеп}}$	0,285
$\Delta(Ba,La,Nd)1O_{12}$	$110 \cdot 10^{-4}$	$\Delta(Ba,La)1O_{12}$	$72 \cdot 10^{-4}$
$(Ba,La,Nd)2 - 3O1$	0,263(2)	$(Ba,La)2 - 3O1$	0,251
$(Ba,La,Nd)2 - 3O2$	0,250(2)	$(Ba,La)2 - 3O2$	0,253
$(Ba,La,Nd)2 - 3O3$	0,292(2)	$(Ba,La)2 - 3O3$	0,292
$(Ba,La,Nd)2 - 3O2$	0,310(3)	$(Ba,La)2 - 3O2$	0,307
$((Ba,La,Nd)2 - O)_{\text{сеп}}$	0,279	$((Ba,La)2 - O)_{\text{сеп}}$	0,276
$\Delta(Ba,La,Nd)2O_{12}$	$72 \cdot 10^{-4}$	$\Delta(Ba,La)2O_{12}$	$78 \cdot 10^{-4}$
$(Ba,La,Nd)3 - 3O3$	0,270(2)	$(Ba,La)3 - 3O3$	0,252
$(Ba,La,Nd)3 - 6O2$	0,256(3)	$(Ba,La)3 - 6O2$	0,271
$(Ba,La,Nd)3 - 3O3$	0,285(2)	$(Ba,La)3 - 3O3$	0,305
$((Ba,La,Nd)3 - O)_{\text{сеп}}$	0,267	$((Ba,La)3 - O)_{\text{сеп}}$	0,275
$\Delta(Ba,La,Nd)3O_{12}$	$20 \cdot 10^{-4}$	$\Delta(Ba,La)3O_{12}$	$48 \cdot 10^{-4}$
$Ti1 - 3O1$	0,188(1)	$Ti1 - 3O1$	0,184
$Ti1 - 3O2$	0,209(2)	$Ti1 - 3O2$	0,214
$(Ti1 - O)_{\text{сеп}}$	0,199	$(Ti1 - O)_{\text{сеп}}$	0,199
$\Delta Ti1O_6$	$28 \cdot 10^{-4}$	$\Delta Ti1O_6$	$57 \cdot 10^{-4}$
$Ti2 - 3O2$	0,203(2)	$Ti2 - 3O2$	0,191
$Ti2 - 3O3$	0,199(1)	$Ti2 - 3O3$	0,201
$(Ti2 - O)_{\text{сеп}}$	0,201	$(Ti2 - O)_{\text{сеп}}$	0,196
$\Delta Ti2O_6$	$1 \cdot 10^{-4}$	$\Delta Ti2O_6$	$7 \cdot 10^{-4}$

\* Міжблочні відстані.

пруженості в міжблочному просторі ШПС. Такий характер структурних змін у будові ШПС фази  $\text{BaLa}_{2,5}\text{Nd}_{1,5}\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  сприяє дестабілізації ШПС і дає підстави для висновку, що саме ці фактори обумовлюють обмеженість області твердих розчинів  $\text{BaLa}_{4-x}\text{Nd}_x\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  ( $0 \leq x \leq 1,55$ ) з ШПС.

Таким чином, у даній роботі встановлено область існування та природу фаз  $\text{BaLa}_{4-x}\text{Nd}_x\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  з ШПС та визначено будову ШПС фази  $\text{BaLa}_{2,5}\text{Nd}_{1,5}\text{Ti}_4\text{O}_{15}$ . На підставі аналізу одержаних результатів виявлено характер впливу ізовалентного заміщення атомів лантану в ШПС титанату  $\text{BaLa}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  на ступінь деформації міжблочних поліедрів  $(\text{Ba,Ln})\text{O}_{12}$  та на довжину міжблочних зв'язків  $(\text{Ba,Ln}) - \text{O}$ .

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Sebastian M. T. Dielectric Materials for Wireless Communication. Oxford: Elsevier, 2008. 671 p.
2. Lichtenberg F., Herrnerge A., Wiedenmann K. Synthesis, structural, magnetic and transport properties of layered perovskite-related titanates, niobates and tantalates of the type  $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$ ,  $\text{A}^I\text{A}_{k-1}\text{B}_k\text{O}_{3k+1}$  and  $\text{A}_m\text{B}_{m-1}\text{O}_{3m}$ . *Progr. Solid State Chem.* 2008. **36**, № 4. P. 253–387. doi: <https://doi.org/10.1016/j.progsolidstchem.2008.10.001>
3. Pei J., Yue Z., Zhao F., Li W., Gui Z., Li L. Preparation and characterization of citrate sol-gel derived  $\text{CaLa}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  microwave dielectric ceramics. *Key Eng. Mater.* 2008. **368-372**. P. 167–169. doi: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.368-372.167>
4. Li X., Zheng X., Liang B., Tang D., Zhang X. Synthesis and properties of  $\text{CaLa}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  microwave dielectric ceramics. *J. Chin. Ceram. Soc.* 2008. **36**, № 12. P. 1695–1699.
5. Jawahar I.N., Santha N.I., Sebastian M.T., Mohanan P. Microwave dielectric properties of  $\text{MO} - \text{La}_2\text{O}_3 - \text{TiO}_2$  ( $\text{M} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$ ) ceramics. *J. Mater. Res.* 2002. **17**, № 12. P. 3084–3089.
6. Titov Yu.A., Slobodyanik N. S., Polubinskii V. V. Mechanisms for the formation of laminar titanates  $\text{A}^{II}_{n-4}\text{La}_4\text{Ti}_{n-1}\text{O}_{3n}$  from coprecipitated component systems. *Theor. Exp. Chem.* 2012. **48**, № 3. P. 189–193.
7. Марків В.Я., Білявіна Н.М. Апаратно-програмний комплекс для дослідження полікристалічних речовин за їх дифракційними спектрами. *Конструкційні та функціональні матеріали: Тези доп. Другої міжнар. наук. конф. (Львів, 14–16 жовт. 1997)*. Львів: Вид-во наук. тов-ва ім. Т.Г. Шевченка, 1997. С. 260–261.
8. Teneze N., Mercurio D., Trolliard G., Frit B. Cation-deficient perovskite-related compounds  $(\text{Ba,Ln})\text{Ti}_{n-1}\text{O}_{3n}$  ( $n = 4, 5, \text{ and } 6$ ): a Rietveld refinement from neutron powder diffraction data. *Mat. Res. Bull.* 2000. **35**, № 10. P. 1603–1614.

Надійшло до редакції 14.07.2017

#### REFERENCES

1. Sebastian, M. T. (2008). Dielectric Materials for Wireless Communication. Oxford: Elsevier.
2. Lichtenberg, F., Herrnerge, A. & Wiedenmann, K. (2008). Synthesis, structural, magnetic and transport properties of layered perovskite-related titanates, niobates and tantalates of the type  $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$ ,  $\text{A}^I\text{A}_{k-1}\text{B}_k\text{O}_{3k+1}$  and  $\text{A}_m\text{B}_{m-1}\text{O}_{3m}$ . *Progr. Solid State Chem.*, 36, No. 4, pp. 253-387. doi: <https://doi.org/10.1016/j.progsolidstchem.2008.10.001>
3. Pei, J., Yue, Z., Zhao, F., Li, W., Gui, Z. & Li, L. (2008). Preparation and characterization of citrate sol-gel derived  $\text{CaLa}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  microwave dielectric ceramics. *Key Eng. Mater.*, 368-372, pp. 167-169. doi: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.368-372.167>
4. Li, X., Zheng, X., Liang, B., Tang, D. & Zhang, X. (2008). Synthesis and properties of  $\text{CaLa}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  microwave dielectric ceramics. *J. Chin. Ceram. Soc.*, 36, No. 12, pp. 1695-1699.
5. Jawahar, I. N., Santha, N. I., Sebastian, M. T. & Mohanan, P. (2002). Microwave dielectric properties of  $\text{MO} - \text{La}_2\text{O}_3 - \text{TiO}_2$  ( $\text{M} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$ ) ceramics. *J. Mater. Res.*, 17, No. 12, pp. 3084-3089.
6. Titov, Yu. A., Slobodyanik, N. S. & Polubinskii, V. V. (2012). Mechanisms for the formation of laminar titanates  $\text{A}^{II}_{n-4}\text{La}_4\text{Ti}_{n-1}\text{O}_{3n}$  from coprecipitated component systems. *Theor. Exp. Chem.*, 48, No. 3, pp. 189-193.

7. Markiv, V. & Belyavina, N. (1997, October). Hardware - program complex for research of polycrystalline substances on them diffraction spectra. Proceedings of the 2nd International Scientific Conference of Engineering and Functional Materials, (pp. 260-261), Lviv: Taras Shevchenko Scientific Society (in Ukrainian).
8. Teneze, N., Mercurio, D., Trolliard, G. & Frit, B. (2000). Cation-deficient perovskite-related compounds  $(Ba,La)_nTi_{n-1}O_{3n}$  ( $n = 4, 5, \text{ and } 6$ ): a Rietveld refinement from neutron powder diffraction data. Mat. Res. Bull., 35, No. 10, pp. 1603-1614.

Received 14.07.2017

Ю.А.Титов<sup>1</sup>, Н.Н.Белявина<sup>1</sup>, Н.С.Слободяник<sup>1</sup>, М.В.Тимошенко<sup>1</sup>, В.В.Чумак<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко

<sup>2</sup> Житомирский государственный университет им. Ивана Франко

E-mail: tit@univ.kiev.ua

### ВЛИЯНИЕ ИЗОВАЛЕНТНОГО ЗАМЕЩЕНИЯ АТОМОВ ЛАНТАНА В $BaLa_4Ti_4O_{15}$ НА СТРОЕНИЕ ЕГО СЛОИСТОЙ ПЕРОВСКИТОПОДОБНОЙ СТРУКТУРЫ

Определены условия замещения атомов La на атомы Nd в слоистой перовскитоподобной структуре (СПС) титаната  $BaLa_4Ti_4O_{15}$ . Методом рентгеновской дифракции порошка определена СПС фазы  $BaLa_{2.5}Nd_{1.5}Ti_4O_{15}$  со степенью замещения, близкой к максимальной. Анализ строения СПС  $BaLa_{2.5}Nd_{1.5}Ti_4O_{15}$  показал, что вхождение атомов Nd в СПС  $BaLa_4Ti_4O_{15}$  приводит к увеличению степени деформации межблочных полиэдров  $(Ba,Ln)1O_{12}$  и уменьшению длины межблочных расстояний  $(Ba,Ln)1 - 3O1$ . Оба фактора дестабилизируют СПС и ограничивают область существования твердых растворов  $BaLa_{4-x}Nd_xTi_4O_{15}$  значением  $x \leq 1,55$ .

**Ключевые слова:** титанат  $BaLa_4Ti_4O_{15}$ , слоистая перовскитоподобная структура, порошковая рентгеновская дифракция.

Y.A.Titov<sup>1</sup>, N.M. Belyavina<sup>1</sup>, M.S.Slobodyanik<sup>1</sup>, M.V.Timoschenko<sup>1</sup>, V.V.Chumak<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Taras Shevchenko National University of Kiev

<sup>2</sup> Zhytomyr Ivan Franko State University

E-mail: tit@univ.kiev.ua

### INFLUENCE OF THE ISOVALENT SUBSTITUTION OF LA ATOMS IN $BaLa_4Ti_4O_{15}$ ON THE CONSTITUTION OF ITS SLAB PEROVSKITE-LIKE STRUCTURE

Conditions of the substitution of La for Nd atoms in slab perovskite-like structure (SPS) of the titanate  $BaLa_4Ti_4O_{15}$  are determined. SPS of phase  $BaLa_{2.5}Nd_{1.5}Ti_4O_{15}$  with a degree of replacement close to maximal has been determined by X-ray powder diffraction. The analysis of the constitution of SPS  $BaLa_{2.5}Nd_{1.5}Ti_4O_{15}$  has shown that the insertion of Nd atoms in SPS  $BaLa_4Ti_4O_{15}$  results in an increase of the degree of deformation of interblock polyhedra  $(Ba,Ln)1O_{12}$  and in a decrease of the length of interblock distances  $(Ba,Ln)1 - 3O1$ . Both factors destabilize SPS and limit the existence domain of solid solutions of  $BaLa_{4-x}Nd_xTi_4O_{15}$  by the value  $x \leq 1.55$ .

**Keywords:** titanate  $BaLa_4Ti_4O_{15}$ , slab perovskite-like structure, X-ray powder diffraction.

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.03.110>

УДК 581: 581.1: 581.2: 581.5: 581.137.3: 576.3

**В.И. Емельянов, С.А. Поляковский, В.И. Сакада,**

**Д.М. Гродзинский**, акад. НАН Украины

Институт клеточной биологии и генетической инженерии НАН Украины, Киев

E-mail: vldeml@ukr.net

## **Растительные клетки формируют свои защитные структуры из молекул фитопатогенных микроорганизмов**

*Растительные клетки способны формировать свои структуры за счет молекул, входивших в состав клеточных стенок патогенных для них грибов. Авторадиографический анализ показал наличие <sup>14</sup>C-глюкозы в структурах клеток лука, которая до этого входила в состав клеточных стенок патогенного гриба *Botrytis cinerea*. Радиоизотопный метод позволил определить наличие меченой глюкозы в структурах клеток *Allium cepa*, в частности защитного β-1,3-глюкана – каллозы.*

**Ключевые слова:** растительные клетки, фитопатогенные микроорганизмы, *Allium cepa*, *Botrytis cinerea*, каллоза.

Растения обладают комплексом эволюционно закрепленных механизмов защиты от патогенных для них микроорганизмов. В системе растение – патоген на первых этапах взаимодействия важную роль играют конституционные гидролитические ферменты – глюканазы и хитиназы [1]. Основной функцией этих ферментативных комплексов является разрушение молекул полимеров, которые формируют клеточные стенки грибов, и высвобождение из них сигнальных молекул – элиситоров [2], олигомеров и мономеров сахаров.

Элиситоры, связываясь с рецепторами плазматической мембраны [3], по мере повышения их концентрации изменяют разность потенциалов между ее внешней и внутренней поверхностью. Достижение критического значения разности потенциалов плазматической мембраны клеток вызывает ее деполяризацию, изменение ионной проницаемости [4], опосредованную вторичными мессенджерами генетически детерминированную индукцию защитных реакций [5]. При низкой концентрации патогена, когда конституционные растительные гидролазы способны утилизировать все его структуры до моносахаров, генетически детерминированного защитного ответа не происходит [6, 7], так как в периплазматическом пространстве будут отсутствовать элиситор-активные олигомеры. Растительные клетки при этом получают потенциальный “сахарный” ресурс, который могут использовать для собственных нужд. Локальная сборка полимерной цепи β-1,3-связанной глюкозы в зоне контакта со структурами патогена — одна из реакций потенциального использования этих гексоз [6].

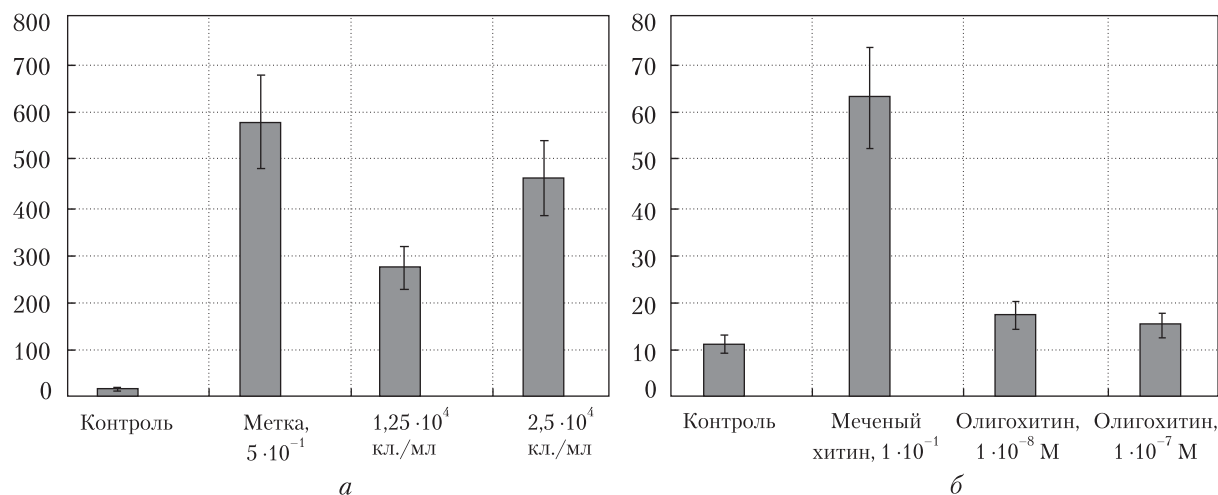
В работах многих авторов показан Ca<sup>2+</sup> зависимый путь синтеза каллозы как генетически детерминированного ответа, однако известно также, что в растительных клетках всег-

да присутствует некоторое конституционное количество данного глюкоана, которое зачастую составляет 10–20 % максимально синтезируемого у растений в ответ на биотический стресс [8]. Таким образом, вполне вероятно, что продукты ферментативного гидролиза могут использоваться растительными клетками для сборки  $\beta$ -1,3-полимерной цепи глюкозы в местах локального патогенеза [9]. Для этого трансмембранный трехдоменный комплекс каллозосинтазы [4] должен иметь внешние рецепторные участки, которые опосредованно изменению своего электрохимического потенциала (заряда) приведут к конформационным изменениям и активации работы его каталитического домена, либо, как вариант, ферментативный комплекс может “включаться” просто при наличии субстрата.

В настоящей работе рассмотрен вопрос патогениндуцированного формирования механического защитного барьера каллозы в клетках чешуй *Allium cepa* при инокуляции неспецифическим патогенным луком — *Botrytis cinerea*. Показан путь реализации растительными клетками локального механического защитного барьера, рассмотрен механизм его формирования. В работе [6] была выдвинута гипотеза о том, что накопление каллозы, как защитной реакции, может осуществляться без включения сигнальных систем [7] и деполяризации плазматической мембраны, а лишь благодаря локальной сборке полимерной цепи  $\beta$ -1,3-связанной глюкозы из молекул разрушенных фрагментов клеточной стенки патогена. Предложен оригинальный способ введения  $^{14}\text{C}$ -глюкозы в структуру клеточных стенок патогена *B. cinerea* (за что мы выражаем искреннюю благодарность старшему научному сотруднику отдела биофизики и радиобиологии Института клеточной биологии и генетической инженерии НАН Украины Н.И. Гуще) с последующей инокуляцией спор гриба в клетки чешуй лука.

**Материалы и методы.** Микробиологическим крючком отбирали необходимое количество культуры клеток гриба и растворяли в 5 мл 0,01 мМ раствора Triton [10]. Ресуспензировали в виброколебателе и центрифугировали 15 мин при 3000 об/мин, после чего удаляли надосадочную жидкость, ресуспензировали осадок в 1 мл дистиллированной воды. Затем отмывали центрифугированием в течение 15 мин при тех же оборотах, отбирали надосадочную жидкость и прибавляли стерильную воду для удаления остатков раствора Triton. Последнюю процедуру повторяли трижды. Для проращивания спор *B. cinerea* в пробирки добавляли жидкую питательную среду PDB, содержащую также 2 мкл  $^{14}\text{C}$ -глюкозы, и оставляли на 3 ч. По прошествии времени споры отмывали трехкратным центрифугированием в стерильной дистиллированной воде. Количество пророщенных спор подсчитывали в камере Горяева, разбавляли стерильной водой, доводя до необходимых в эксперименте концентраций.

Пророщенные споры патогена добавляли в капельный диффузат, расположенный на поверхности полусфер клеток чешуй лука, ресуспензировали и оставляли во влажной камере на 16 ч, после чего удаляли капельный диффузат с чешуй и вырезали из области инокуляции 300 мг клеток лука, трехкратно отмывали их в 50 мл дистиллированной воды. Для удаления аутофлуоресцентного материала клетки выдерживали час в 70 % растворе этанола, измельчали в фарфоровой ступке с использованием жидкого азота. Каллозу выделяли по методу Каусса [5]. 1 мл раствора экспериментальных образцов, содержащих каллозу, ресуспензировали в 9 мл сцинтилляционной жидкости [11]. Радиоизотопный анализ  $\beta$ -активности проводили на радиометре Rack-Betta.



β-активность каллозы клеток *Allium cepa* после 16-часовой инкубации со спорами неспецифического патогена лука *Botrytis cinerea* (а) и с субстратом –  $^3\text{H}$ -полихитином (б)

**Результаты и обсуждение.** По результатам инкубации неспецифического патогена лука – *B. cinerea* в полусферах чешуй в течение 16 ч установлена способность клеток *A. cepa* использовать  $^{14}\text{C}$ -глюкозу, входившую в состав структур клеточной стенки патогенного гриба. Изучение взаимодействия в системе растение – патоген показало способность клеток лука усваивать в среднем 15–20 %  $^{14}\text{C}$ -глюкозы, добавленной в среду с прорастающими спорами патогена. В клетки контрольных образцов инокулировали такие же концентрации пророщенных спор грибов без меченого субстрата с последующим выделением из них каллозы в качестве контроля для радиоизотопного анализа. В зависимости от базовой концентрации патогена (рисунок, а), взаимодействие клеток чешуй лука с инокулятом неспецифического патогена *B. cinerea* в концентрациях  $1,25 \cdot 10^4$ – $2,5 \cdot 10^4$  клеток/мл приводило к повышению β-активности выделенной из клеток *A. cepa* каллозы в пределах 270–459 β-импульсов в минуту (срм).

Таким образом, за счет активности растительных гидролаз мономеры и, возможно, олигомеры глюкозы с β-1,3-гликозидной связью, “вырезанные” из структур патогена, использовались ферментативным комплексом каллозосинтазы для сборки β-1,3-полиглюкановой цепи – механического защитного барьера растительных клеток. Предположение об использовании входивших в структуру клеточных стенок патогена молекул для формирования собственных защитных структур растительными клетками получило свое подтверждение.

В работе [6] было высказано предположение о возможном пути преобразования полимерной цепи хитина в глюкозу. Результаты исследования элиситориндуцируемого синтеза каллозы показали неспособность клеток чешуй лука трансформировать структуру  $^3\text{H}$ -полихитина до глюкозы. Инкубация меченого субстрата, имеющего активность 630 срм, с клетками чешуй лука экспериментальных образцов, предварительно обработанных активными концентрациями элиситоров [5, 11], не повлияла на изменение β-активности каллозы и была соизмерима с контролем (см. рисунок, б).

Результаты эксперимента свидетельствуют об отсутствии способности ферментативного аппарата клеток чешуй *A. cepa* преобразовывать молекулы полимера хитина до глюкозы.



В заключение необходимо отметить, что на примере лука показана способность растительных клеток формировать механический защитный барьер – каллозу из молекул  $^{14}\text{C}$ -глюкозы, входивших в состав клеточных стенок патогенного гриба *V. cenerea*. Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что в процессе эволюции растения приобрели способность использовать молекулярные ресурсы патогенных микроорганизмов для создания собственных структур. В частности, формирование генетически недетерминированного локального механического защитного барьера – каллозы в местах проникновения грибов, несомненно, уменьшает время ответа растительных клеток на биотический стресс, а следовательно, увеличивает резистентность растений к патогенезу. Сборка полицепи  $\beta$ -1,3-глюкана является механизмом снижения энтропии системы за счет упорядочивания [12] разрушенных в ходе обоюдной ферментативной атаки [13] структур. Таким образом, фактически происходит диссипация, которая приводит к образованию новой структуры. Подобный механизм формирования механического защитного барьера, как реакции иммунного ответа, имеет реверсную природу, так как для его реализации необходим только субстрат – разрушенные структуры патогенного микроорганизма в некотором количестве, что, собственно, и вызывает реакцию-ответ. При взаимодействии растения с микромицетами также происходит разрушение структур клеточной стенки растительных клеток, содержащих глюкозу [13]. Вероятно, что комплекс каллосинтазы может восстанавливать и собственные разрушенные патогеном структуры, синтезируя ту же каллозу с последующей возможностью ее преобразования в целлюлозные структуры клеточной стенки [14] в пост-стрессовый период.

Открытый механизм можно называть реакцией локального реверсного накопления каллозы, или, если шире, реакцией локального реверсного иммунитета. Исследования в области генетически недетерминированных реакций ответов, которые не требуют дополнительного синтеза и/или транспорта химических соединений, могут стать перспективным направлением фундаментальных научных исследований с применением полученных результатов в биотехнологии растений.

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Емельянов В.И., Дмитриев А.П. Индуцированное увеличение хитиназной активности в клетках томата (*Lycopersicon esculentum* L.). *Цитология и генетика*. 2007. **41**, № 5. С. 27–31.
2. Benhamou N., Joosten M., De Wit P. J. G. M. Subcellular localization of chitinase and of its potential substrate in tomato root tissue infected by *Fusarium oxysporum* f. sp. *radicis-lycopersici*. *Plant Physiol.* 1990. **92**. P. 1108–1120.
3. Vaureithel K., Felix G., Boller T. Specific, high affinity binding of chitin fragments to tomato cells and membranes: Competitive inhibition of binding by derivatives of chitooligosaccharides and a Nod factor of *Rhizobium*. *J. Biol. Chem.* 1994. **27**. P. 17931–17938.
4. Тарчевский И.А. Сигнальные системы клеток растений. Москва: Наука, 2002. 294 с.
5. Емельянов В.И., Кравчук Ж.Н., Поляковський С.О., Дмитриев А.П. Отложение каллозы при обработке клеток томатов (*Lycopersicon esculentum* L.) биотическими элизиторами. *Цитология и генетика*. 2008. **42**, № 2. С. 21–28.
6. Емельянов В.И. Механизм кальцийнезависимого индуцированного отложения каллозы в растительных клетках. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2010. № 7. С. 146–148.
7. Nishimura M.T., Stein M., Hou B.H., Vogel J.P., Edwards H., Somerville S. Loss of callose synthase result in salicylic acid-dependent disease resistance. *Science*. 2003. **301**. P. 969 – 972.

8. Емельянов В.И., Кравчук Ж.Н. Сравнительная характеристика индукции каллозообразования в суспензионных культурах лука и томата. *Вісн. Дніпропетр. ун-ту. Біологія. Екологія*. 2001. **9**. С. 235–241.
9. Kauss H. Callose synthesis. *Membranes: Specialized Functions in Plants*. Guildford: Bios Scientific Publishers, 1996. P. 77–92.
10. Поляковский С.А., Кравчук Ж.Н., Дмитриев А.П. Механизм действия индуктора устойчивости β-аминобутириловой кислоты у *Allium cepa*. *Цитология и генетика*. 2008. **42**, № 6. С. 8–12.
11. Емельянов В.И., Дмитриев О.П., Гродзинский Д.М. Індукція хітиназної активності хітиновими фрагментами різної довжини в суспензійній культурі клітин томату (*Lycopersicon esculentum*). *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 1999. № 11. С. 156–158.
12. Кондепуди Д., Пригожин И. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. Москва: Мир, 2002. 461 с.
13. Дмитриев А.П. Фитоалексины и их роль в устойчивости растений. Киев: Наук. думка, 1999. 209 с.
14. Недуха О.М. Калоза: локалізація, функції та синтез. *Цитология и генетика*. 2015. **49**, № 1. С. 61–70.

Поступило в редакцию 28.09.2017

## REFERENCES

1. Emelyanov, V. I. & Dmitriev, A. P. (2007). Induced increase in chitinase activity in tomato cells (*Lycopersicon esculentum* L.). *Cytol. Gen.*, 41, Iss. 5, pp. 284-287.
2. Benhamou, N., Joosten, M., De Wit, P. J. G. M. (1990). Subcellular localization of chitinase and of its potential substrate in tomato root tissue infected by *Fusarium oxysporum* f. sp. *radicis-lycopersici*. *Plant Physiol.*, 92, pp. 1108-1120.
3. Baureithel, K., Felix, G. & Boller, T. (1994). Specific, high affinity binding of chitin fragments to tomato cells and membranes: Competitive inhibition of binding by derivatives of chitoooligosaccharides and a Nod factor of *Rhizobium*. *J. Biol. Chem.*, 27, pp. 17931-17938.
4. Tarchevsky, I.A. (2002). Plant cell signaling systems. Moscow: Nauka (in Russian).
5. Emelyanov, V. I., Kravchuk, J. N., Polyakovskiy, S. A. & Dmytriev, A. P. (2008). Callose accumulation under treatment of tomato (*Lycopersicon esculentum* L.) cells with biotic elicitors. *Tsitol. Genet.*, 42, No. 2, pp. 21-28 (in Russian).
6. Emelyanov, V.I. (2010). Calcium-independent mechanism of callose synthesis in plant cell. *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.*, No. 7, pp. 146-148 (in Russian).
7. Nishimura, M. T., Stein, M., Hou, B. H., Vogel, J. P., Edwards, H. & Somerville, S. (2003). Loss of callose synthase result in salicylic acid-dependent disease resistance. *Science*, 301, pp. 969-972.
8. Emelyanov, V. I. & Kravchuk, J. N. (2001). Callose induce accumulation in suspension cultures of onion and tomato. *Visnyk Dnipropetr. un-tu. Biol. Ecol.*, 9, pp. 235-241 (in Russian).
9. Kauss, H. (1996). Callose synthesis. In *Membranes: Specialized functions in plants* (pp. 77-92). Guildford: Bios Scientific Publishers.
10. Polyakovskiy, S. A., Kravchuk, J. N. & Dmytriev, A. P. The mechanisms of action of plant resistance inductors by the example of *Allium cepa*. *Tsitol. Genet.*, 42, No. 6, pp. 8-12 (in Russian).
11. Emelyanov, V. I., Dmytriev, A. P. & Grodzinskiy, D. M. (1999). Induction of chitinase activity by chitin fragments of different lengths in suspending culture cells of tomato (*Lycopersicon esculentum*). *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.*, No. 11, pp. 156-158 (in Ukrainian).
12. Kondepudi, D. & Prigogine, I. (2002). Modern thermodynamics. From heat engines to dissipative structures. New York: Wiley.
13. Dmytriev, A. P. (1999). Phytoalexins and their role in plant resistance. Kiev: Naukova Dumka (in Russian).
14. Neduha, O. M. (2015). Callose: Localization, functions, and synthesis in plant cells. *Cytol. Gen.*, 49, Iss. 1, pp. 49-57.

Received 28.09.2017

V.I. Emelyanov, S.O. Polyakovskiy, V.I. Sakada, D.M. Grodzinskiy

Institute of Cell Biology and Genetic Engineering of the NAS of Ukraine, Kiev

E-mail: vldeml@ukr.net

### РОСЛИННІ КЛІТИНИ ФОРМУЮТЬ СВОЇ ЗАХИСНІ СТРУКТУРИ З МОЛЕКУЛ ФІТОПАТОГЕННИХ МІКРООРГАНІЗМІВ

Рослинні клітини здатні формувати свої структури за рахунок молекул, що входили до складу клітинних стінок патогенних для них грибів. Авторадіографічний аналіз показав наявність <sup>14</sup>C-глюкози в структурах клітин цибулі, яка до того входила до складу клітинних стінок патогенного гриба *Botrytis cinerea*. Радіоізотопним методом аналізу встановлено наявність міченої глюкози в структурах клітин *Allium cepa*, а саме захисного β-1,3-глюкану — калози.

**Ключові слова:** рослинні клітини, фітопатогенні мікроорганізми, *Allium cepa*, *Botrytis cinerea*, калоза.

V.I. Emelyanov, S.A. Polyakovskiy, V.I. Sakada, D.M. Grodzinskiy

Institute of Cell Biology and Genetic Engineering of the NAS of Ukraine, Kiev

E-mail: vldeml@ukr.net

### PLANT CELLS FORMED THEIR PROTECTIVE STRUCTURES USE MOLECULES OF PHYTOPATHOGENIC MICROORGANISMS

During pathogenesis, plant cells are capable to forming their own structures at the expense of the molecules, which were a part of fungi cell walls. Autoradiographic analysis showed the presence of <sup>14</sup>C-glucose in cells of onion, which were recently the compounds of the cell walls *Botrytis cinerea*. Radioisotope method confirmed the presence of labeled glucose in *Allium cepa* cells, the protective poly-β-1,3-glucose – callose.

**Keywords:** plant cells, phytopathogenic microorganisms, *Allium cepa*, *Botrytis cinerea*, callose.

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2018.03.116>

УДК 536.6:[615.361:615.451.1:618.46]:577.352.332

**Ю.С. Говорова<sup>1</sup>, О.В. Зінченко<sup>1</sup>, О.Ю. Семенченко<sup>1</sup>,  
О.М. Боброва<sup>1</sup>, Е.О. Нардід<sup>1</sup>, О.А. Нардід<sup>1, 2</sup>**

<sup>1</sup> Інститут проблем кріобіології і кріомедицини НАН України, Харків

<sup>2</sup> Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна

E-mail: [yu.govorova7@gmail.com](mailto:yu.govorova7@gmail.com)

## **ДСК-дослідження дії фракцій екстрактів плаценти людини на термічну стабільність білкових комплексів еритроцитарних мембран**

*Представлено академіком НАН України А.М. Гольцевим*

*Методом диференціальної адиабатичної сканувальної калориметрії досліджено вплив фракцій екстрактів плаценти на теплову денатурацію мембранозв'язаних білків еритроцитів. На термограмі денатурації білих тіней еритроцитів зареєстровано чотири переходи. Показано, що додавання фракцій екстрактів плаценти до суспензії мембранозв'язаних білків еритроцитів призводить до підвищення значень температури денатурації всіх груп білків, за винятком спектрину.*

**Ключові слова:** фракції екстрактів плаценти, тіні еритроцитів, диференціальна сканувальна калориметрія, теплова денатурація.

Багато років плацента людини привертає увагу дослідників через її важливу роль у розвитку і зростанні ембріона [1]. Безліч біологічних функцій плаценти визначається не тільки набором індивідуальних білків, що входять до її складу, а також різноманітними їхніми комплексами. Таким чином, характеристика мультибілкових комплексів плаценти є важливим кроком у розумінні функціонування плаценти [2].

Відомо, що отримані з екстрактів плаценти фракції збільшують стійкість еритроцитів до нефізіологічних факторів середовища [3]. Такий вплив екстрактів, можливо, обумовлений взаємодією білків плаценти з мембранами еритроцитів. У зв'язку з цим дослідження білкових фракцій екстрактів плаценти людини (ЕПЛ), а також їх вплив на різноманітні модельні системи також має певний інтерес.

Для аналізу дії фракцій ЕПЛ різних молекулярних мас на мембранозв'язані білки еритроцитів на молекулярному рівні застосовується метод диференціальної сканувальної калориметрії (ДСК). Калориметрія – прямий метод, який дає змогу вимірювати термодинамічні і кінетичні параметри теплової денатурації білків і вивчати енергетику процесів, пов'язану

© Ю.С. Говорова, О.В. Зінченко, О.Ю. Семенченко, О.М. Боброва, Е.О. Нардід, О.А. Нардід, 2018

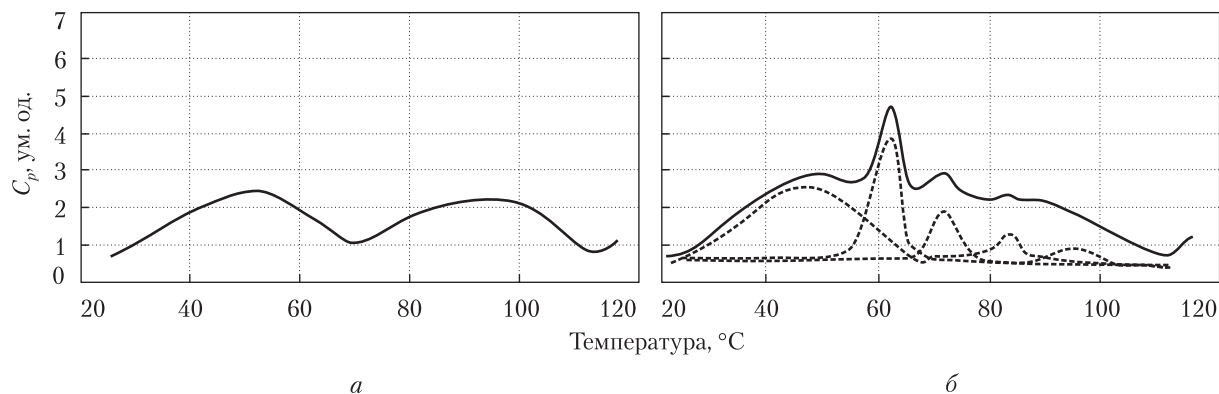
з їх конформаційними перетвореннями [4]. Ми ставили за мету дослідження термоденатурації білків, що входять до складу фракцій ЕПЛ, а також аналіз дії цих фракцій на теплову денатурацію білків еритроцитарних мембран.

**Матеріали і методи.** Екстракт плаценти отримували таким чином: свіжоодержану плаценту відмивали ізотонічним розчином NaCl, подрібнювали на фрагменти  $3 \times 2$  см, які теж ретельно відмивали фізіологічним розчином. Відмиті фрагменти плаценти з фізіологічним розчином (1 : 1) гомогенізували на високошвидкісному гомогенізаторі РТ-1 У4.2 протягом 3 хв. Далі гомогенати витримували протягом 12 год при  $4^\circ\text{C}$  та центрифугували 25 хв при 1500 g. Надосадову рідину пропускали через мембранний фільтр 0,45 мкм ("Millipore Corp. Carrigtwohill", Ірландія). Отриманий фільтрат є водно-сольовим екстрактом плаценти. Окремі фракції екстрактів виділяли методом гель-хроматографії з використанням сефадексу G-100 [5]. Досліджували три типи фракцій: з мол. масою  $<4$ , 50–60 та  $>150$  кДа.

Білі тині еритроцитів отримували з еритроцитів донорської крові (чоловіча, А(II)+), яка була надана Харківським обласним центром служби крові. Еритроцити відокремлювали від плазми і формених елементів крові одноразовим центрифугуванням протягом 5 хв при 1500 g. Подальші два відмивання проводили у десятиразовому обсязі фізіологічного розчину. Тині отримували шляхом триразового відмивання строми еритроцитів від гемоглобіну при 20 000 g протягом 15 хв (5 mM натрій-фосфатний буферний розчин (рН 7,8)). Дослідження термоденатурації фракцій ЕПЛ і мембранозв'язаних білків еритроцитів проводили на диференціальному сканувальному адіабатичному мікрокалориметрі ДАСМ-4. Термограми реєстрували за умов нагрівання зі швидкістю  $1^\circ\text{C}/\text{хв}$ . Область сканування – від  $20$  до  $100^\circ\text{C}$ . Для статистичної обробки результатів використовували критерій Манна–Уїтні.

**Результати і їх обговорення.** На термограмі низькомолекулярної фракції ЕПЛ ( $<4$  кДа) зареєстровано дві хвилеподібні особливості з розмитими максимумами в широких діапазонах температур, які являють собою суперпозицію піків денатурації біологічних компонентів фракції (рис. 1, а).

На калориметричних профілях фракції  $<4$  кДа у температурному діапазоні  $25$ – $70^\circ\text{C}$  розмитий перехід відповідає, вірогідно, денатурації груп біомолекул, таких як білки [6], пептиди і ліпіди [7], хвилеподібна особливість на термограмі в температурному діапазоні  $70$ – $115^\circ\text{C}$ , імовірно, обумовлена плавленням амінокислот, нуклеотидів та ін.



**Рис. 1.** Термограми фракції ЕПЛ з мол. масою  $<4$  кДа (а) і 50–60 кДа (б)

На термограмах фракції >150 кДа досліджених ЕПЛ, як і для фракції <4 кДа, також спостерігається два переходи з розмитими максимумами, які відповідають денатурації груп макромолекул. Однак перший перехід у випадку фракції >150 кДа зміщений на 10 °С у високотемпературну область порівняно з таким для фракції <4 кДа і знаходиться в межах 30–80 °С. Другий перехід денатурації груп макромолекул реєструється в межах 80–120 °С.

Судячи з вигляду калориметричної термограми процесу денатурації фракції 50–60 кДа (рис. 1, б), можна припустити наявність на ній п'яти ендотермічних піків. Деконволюція піків показала, що термограма денатурації фракції 50–60 кДа являє собою суперпозицію п'яти ендотермічних піків (див. рис. 1, б, штрихові лінії). Виявлені максимальні значення температур ендотермічних піків такі: а – 45 °С, б – 62 °С, в – 71 °С, г – 83 °С, д – 95 °С. Інтерпретація піків:

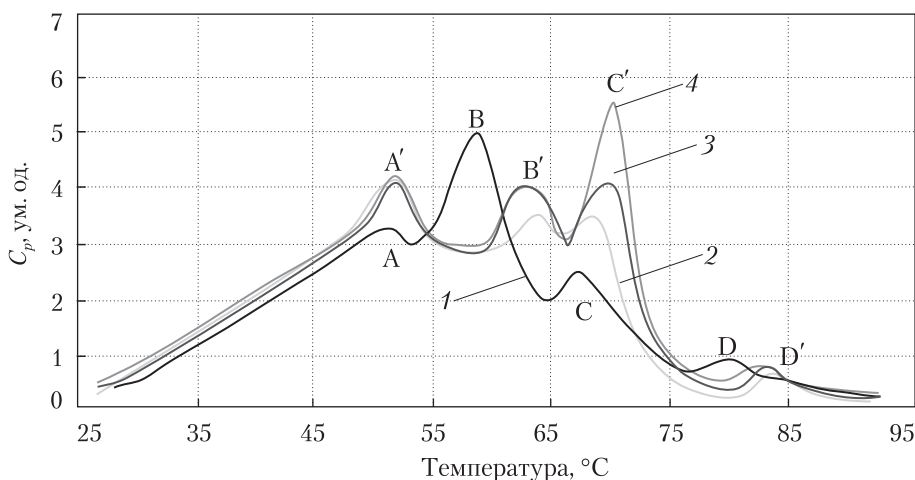
- 1) перехід при близько 45 °С, імовірно, відповідає денатурації термолабільних білків;
- 2) в ендотермічний інтенсивний пік при близько 62 °С значний внесок може здійснювати денатурація альбуміну;
- 3) перехід при близько 71 °С, найімовірніше, обумовлений денатурацією гемоглобіну;
- 4) переходи при близько 83 і 95 °С, імовірно, відповідають денатурації нуклеотидів і інших біологічних компонентів.

У ході дослідження теплової денатурації мембран еритроцитів було виявлено чотири максимуми, які в літературі прийнято позначати А, В, С і D, при  $(51 \pm 0,1)$  °С,  $(58 \pm 0,1)$  °С,  $(67 \pm 0,1)$  °С і  $(80 \pm 0,1)$  °С відповідно (рис. 2, крива 1). Існують декілька класифікацій цих денатураційних переходів [9]. Так, згідно з класифікацією Shnugov [8] перехід А являє собою термоденатурацію білків мембранного каркаса спектрину (смуги 1 і 2 при електрофоретичному розділенні білків еритроцитарної мембрани) і анкірину (смуга 2,1); перехід В – білків смуги 4,2, 4,9 і актину (смуга 5); перехід С – білків смуги 3 (білок, який переносить аніони), смуги 4,1, гліцеральфосфат – дегідрогенази (смуга 6); перехід D – тропоміозину (смуга 7) [8]. У роботах інших дослідників були отримані подібні переходи при вивченні теплової денатурації тіней еритроцитів методом ДСК [9, 10].

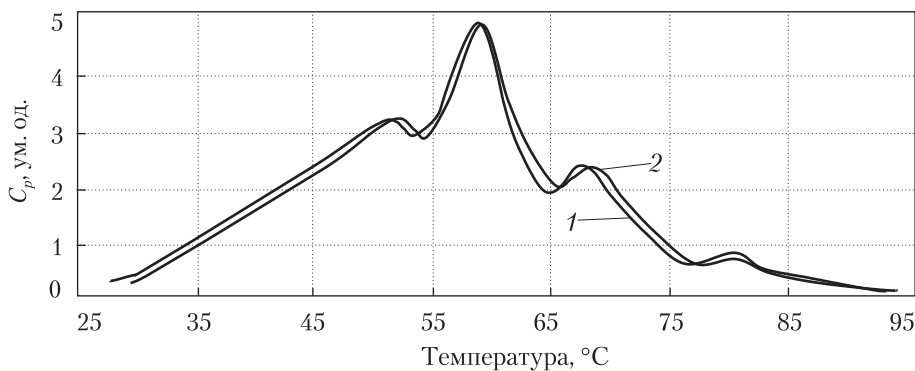
Експозиція протягом 2 год суспензії еритроцитарних мембран з фракціями ЕПЛ з різною молекулярною масою призводить до таких трансформацій на калориметричних профілях: незалежно від молекулярної маси фракції екстрактів на термограмах спостерігається зміщення температур піків денатурації білків (В', С', D') у область більш високих температур (таблиця). Винятком є пік А', значення температури якого залишаються в межах похибки незалежно від молекулярної маси фракції.

За наявності фракцій екстрактів плаценти в суспензіях еритроцитарних мембран спостерігається значне збільшення інтенсивності піка А' (див. рис. 2). Зміна інтенсивності решти піків (В', С', D') залежить від молекулярної маси фракції. Так, наприклад, фракція 50–60 кДа ЕПЛ містить у своєму складі гемоглобін, температура денатурації якого становить 71 °С, що спричиняє значне підвищення інтенсивності піка С' при додаванні відповідної фракції.

Зміни параметрів піків денатурації білків еритроцитарних мембран, які спостерігаються за наявності фракцій, можуть бути обумовлені декількома факторами. По-перше, може відбуватися зв'язування білків еритроцитарних мембран з активними компонентами фрак-



**Рис. 2.** Термограми денатурації мембранних білків еритроцитів: 1 – без фракцій ЕПЛ; 2 – з фракцією <4 кДа; 3 – з фракцією >150 кДа; 4 – з фракцією 50–60 кДа



**Рис. 3.** Термограми денатурації мембранних білків еритроцитів: 1 – контроль; 2 – після інкубування з фракцією <4 кДа і подальшого відмивання від фракції

**Значення температур денатурації мембранних білків еритроцитів за наявності фракцій екстрактів плаценти людини**

Мол. маса фракції, кДа	Пік			
	A'	B'	C'	D'
Без фракцій	51 ± 0,1	58 ± 0,1	67 ± 0,1	80 ± 0,1
>150	51 ± 0,1	62 ± 0,1*	70 ± 0,1*	82 ± 0,1*
50–60	51 ± 0,1	62 ± 0,1*	71 ± 0,1*	82 ± 0,1*
<4	51 ± 0,1	63 ± 0,1*	69 ± 0,1*	83 ± 0,1*

\*  $p < 0,05$  відносно тіней без фракцій ЕПЛ.

цій, по-друге — зареєстровані в сумішах піки обумовлені суперпозицією піків плавлення як білків мембран, так і біологічних складових компонентів фракцій.

З метою перевірки першого припущення суспензії тіней еритроцитів після 2 год інкубування з дослідженими фракціями відмили від фракцій натрій-фосфатним буферним розчином. На рис. 3 наведені як приклад термограми термоденатурації мембранних білків до інкубування (крива 1) і після інкубування і відмивання від низькомолекулярної фракції <4 кДа (крива 2). Термограми практично ідентичні. Цей факт вказує на те, що якщо зв'язування мембранних білків з біологічними компонентами фракцій і відбувається, то воно має оборотний характер.

Таким чином, показано, що досліджені фракції ЕПЛ викликають зміщення значень температур піків денатурації B', C' і D' мембранозв'язаних білків у напрямі високих температур на 4–5 °С, 2–4 °С та 2–3 °С відповідно. Значення температури денатурації піка A' залишається постійним незалежно від молекулярної маси фракції. Зміни інтенсивності піків B', C', D' залежать від молекулярної маси фракції. Виявлено, що зміни температур денатурації мембранозв'язаних білків еритроцитів за наявності фракцій екстрактів плаценти мають оборотний характер.

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Parolini O., Soncini M. Placenta as a source of stem cells and as a key organ for fetomaternal tolerance. *Regenerative medicine using pregnancy-specific biological substances*. London: Springer. 2011. P. 11–23. doi: [https://doi.org/10.1007/978-1-84882-718-9\\_2](https://doi.org/10.1007/978-1-84882-718-9_2)
2. Wang F., Wang L., Xu Zh., Liang G. Identification and analysis of multi-protein complexes in placenta. *PLoS ONE*. 2013. **8**, № 4. e 62988. doi: <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0062988>
3. Nardid O., Repina S., Rozanova E., Cherkashina Ya., Nardid E. Properties of aqueous-saline human placental extracts and their fractions after storage of placenta at various subzero temperatures. *J. Exp. Integr. Med.* 2015. **5**, № 4. P. 172–177. doi: <https://doi.org/10.5455/jeim.231115.or.141>
4. Любарев А.Е., Курганов Б.И. Изучение необратимой тепловой денатурации белков методом дифференциальной сканирующей калориметрии. *Успехи биол. химии*. 2000. № 1–3. С. 43–84.
5. Зінченко А.В., Боброва Е.Н., Говорова Ю.С., Розанова Е.Д., Карпенко В.Г. Влияние низкотемпературного хранения плаценты человека на фазовые переходы во фракциях экстрактов плаценты и в смесях фракций с клетками. *Пробл. криобиологии и криомедицины*. 2015. **25**, № 2. С.122–130.
6. Ku T., Lu P., Chan C., Wang T., Lai S., Lyu P., Hsiao N. Predicting melting temperature directly from protein sequence. *Comput. Biol. Chem.* 2009. **33**. P. 445–450. doi: <https://doi.org/10.1016/j.compbiolchem.2009.10.002>
7. Marangoni A. G., Suresh S. N. *Physical properties of lipids*. Washington: CRC Press, 2002. 592 p.
8. Лапшина Е.А., Заводник И.Б. Термостабильность белков эритроцитарных мембран при варьировании эритроцитарной силы и состава среды. *Биофизика*. 1994. **39**, № 6. С. 1015–1020.
9. Matveev A.V., Akoev V.R., Tarakhnovskii Yu.S., Deev A.A., Bryukhanov V.M., Zhadan G.G., Shnyrov V.L. A comparative study of structural transitions in erythrocyte membranes of adult donors and neonates. *Bull. Exp. Biol. Med.* 1997. **123**, № 2. P. 196–200. doi: <https://doi.org/10.1007/BF02766443>
10. Ivanov I.T., Brahler M., Georgieva R., Baumler H. Role of the membrane proteins in thermal damage and necrosis of red blood cells. *Thermochim. Acta*. 2007. **456**, № 1. P. 7–12. doi: <https://doi.org/10.1016/j.tca.2007.01.020>

Надійшло до редакції 24.11.2017



REFERENCES

1. Parolini O., Soncini M. (2011). Placenta as a source of stem cells and as a key organ for fetomaternal tolerance. In Regenerative medicine using pregnancy-specific biological substances (pp. 11-23). London: Springer. doi: [https://doi.org/10.1007/978-1-84882-718-9\\_2](https://doi.org/10.1007/978-1-84882-718-9_2)
2. Wang, F., Wang, L., Xu, Zh. & Liang, G. (2013). Identification and analysis of multi-protein complexes in placenta. PLoS ONE, 8, No. 4. doi: <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0062988>
3. Nardid, O., Repina, S., Rozanova, E., Cherkashina, Ya. & Nardid, E. (2015). Properties of aqueous-saline human placental extracts and their fractions after storage of placenta at various subzero temperatures. J. Exp. Integr. Med., 5, No. 4, pp. 172-177. doi: <https://doi.org/10.5455/jeim.231115.or.141>
4. Lyubarev, A. E. & Kurganov, B. I. (2000). The studying of irreversible protein denaturation by differential scanning calorimetry method. Uspehi biologicheskoy himii, 40, No. 1-3, pp. 43-84 (in Russian).
5. Zinchenko, A. V., Bobrova, E. N., Govorova, Yu. S., Rozanova, E. D. & Karpenko, V. G. (2015). Effect of low temperature storage of human placenta on phase transitions in fractions of placental extracts and in mixtures of the fractions with cells. Probl. Cryobiol. Cryomed., 25, No. 2, pp. 122-130.
6. Ku, T., Lu, P., Chan, C., Wang, T., Lai, S. Lyu, P. & Hsiao, N. (2009). Predicting melting temperature directly from protein sequence. Comput. Biol. Chem., 33, pp. 445-450. doi: <https://doi.org/10.1016/j.compbiolchem.2009.10.002>
7. Marangoni, A. G. & Suresh, S. N. (2002). Physical properties of lipids. Washington: CRC Press.
8. Lapshina, E. I. & Zavodnik, I. B. (1994). Thermostability of erythrocyte membrains proteins with erythrocyte and medium compounds varying. Biophysika, 39, No. 6, pp. 1015-1020 (in Russian).
9. Matveev, A. V., Akoev, V. R., Tarakhnovskii, Yu. S., Deev, A. A., Bryukhanov, V. M., Zhadan, G. G. & Shnyrov, V. L. (1997). A comparative study of structural transitions in erythrocyte membranes of adult donors and neonates. Bull. Exp. Biol. Med., 123, No. 2, pp. 196-200. doi: <https://doi.org/10.1007/BF02766443>
10. Ivanov, I. T., Brahler, M., Georgieva, G. & Baumler, H. (2007). Role of the membrane proteins in thermal damage and necrosis of red blood cells. Thermochim. Acta, 456, No. 1, pp. 7-12. doi: <https://doi.org/10.1016/j.tca.2007.01.020>

Received 24.11.2017

Ю.С. Говорова<sup>1</sup>, А.В. Зинченко<sup>1</sup>, А.Ю. Семенченко<sup>1</sup>,  
Е.Н. Боброва<sup>1</sup>, Э.О. Нардид<sup>1</sup>, О.А. Нардид<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт проблем криобиологии и криомедицины НАН Украины, Харьков

<sup>2</sup> Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина

E-mail: [yu.govorova7@gmail.com](mailto:yu.govorova7@gmail.com)

ДСК-ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕЙСТВИЯ ФРАКЦИЙ ЭКСТРАКТОВ  
ПЛАЦЕНТЫ ЧЕЛОВЕКА НА ТЕРМИЧЕСКУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ  
БЕЛКОВЫХ КОМПЛЕКСОВ ЭРИТРОЦИТАРНЫХ МЕМБРАН

Методом дифференциальной адиабатической сканирующей калориметрии исследовано влияние фракций экстрактов плаценты на тепловую денатурацию мембраносвязанных белков эритроцитов. На термограмме денатурации белых тений эритроцитов зарегистрировано четыре перехода. Показано, что добавление фракций экстрактов плаценты к суспензии мембраносвязанных белков приводит к повышению значений температуры денатурации всех групп белков, за исключением спектрина.

**Ключевые слова:** фракции экстрактов плаценты, тени эритроцитов, дифференциальная сканирующая калориметрия, тепловая денатурация.

*Yu.S. Govorova*<sup>1</sup>, *O.V. Zinchenko*<sup>1</sup>, *O.Yu. Semenchenko*<sup>1</sup>,  
*O.M. Bobrova*<sup>1</sup>, *E.O. Nardid*<sup>1</sup>, *O.A. Nardid*<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Institute for Problems of Cryobiology and Cryomedicine  
of the NAS of Ukraine, Kharkiv

<sup>2</sup> V.N. Karazin Kharkiv National University  
E-mail: yu.govorova7@gmail.com

DSC INVESTIGATION OF THE INFLUENCE  
OF HUMAN PLACENTA FRACTIONS ON THE THERMAL STABILITY  
OF PROTEIN COMPLEXES OF ERYTHROCYTE MEMBRANES

The effect of placenta extracts fractions on the thermal denaturation of erythrocyte membrane-bound proteins is investigated by differential adiabatic scanning calorimetry. Four transitions are registered on a denaturation thermogram of white erythrocyte ghosts. Adding the placenta extracts fractions to the suspension of erythrocyte membrane-bound proteins leads to increasing the temperature of all protein groups except spectrin.

**Keywords:** *placenta extracts fractions, erythrocyte ghosts, differential scanning calorimetry, thermal denaturation.*

## Інформація для авторів журналу “Доповіді Національної академії наук України”

---

Редакція журналу приймає для публікації повідомлення, що мають *мотивоване представлення* дійсного члена або члена-кореспондента НАН України з відповідної спеціальності. До статті додається *супровідний лист* організації, в якій виконано дослідження.

Журнал друкує не більше *трьох повідомлень одного автора* на рік. Повідомлення дійсних членів та членів-кореспондентів НАН України друкуються без обмежень.

У разі додаткового рецензування та переробки статті датою надходження вважається дата одержання редакцією її остаточного тексту. Прохання редакції про переробку не означає, що стаття прийнята до друку; після переробки вона знову розглядається редколегією. При відмові в публікації роботи редколегія залишає за собою право не повертати автору один екземпляр статті.

Повідомлення публікуються українською, 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).

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 не більше 1/3 сторінки) 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).

*Рукопис* та рисунки (*на окремій сторінці*) слід надсилати у двох екземплярах. Текст має бути набраний через 1,5 інтервала, розмір шрифту 14 пт.

Файл статті подається у форматі .doc, .rtf, .txt. **Текст у файлі повинен точно відповідати надрукованому тексту.** 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 [dopovidinanu@gmail.com](mailto:dopovidinanu@gmail.com)

Номери журналу викладаються у відкритому доступі щомісяця на сайті <http://dopovidi-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](mailto: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  
№ 3 від 12.03.2018

## **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. Канищевої*

Підписано до друку 12.03.2018.  
Формат 84×108/16. Гарн. Петербург.  
Ум. друк. арк. 12,81.  
Обл.-вид. арк. 11,80.  
Тираж 164 прим. Зам. 5188.

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; Є. В. ЛЕБЕДЕСВ, 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. GOZHUK,  
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. ILCHENKO, 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; Ye. V. LEBEDEV,  
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