



**ОПОВІДІ**  
НАЦІОНАЛЬНОЇ  
АКАДЕМІЇ НАУК  
УКРАЇНИ

8 • 2012

---

Науково-теоретичний журнал Президії Національної академії наук України

Заснований у 1939 р.

Виходить щомісяця

---

**РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ ЖУРНАЛУ**

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

© Національна академія наук України, 2012

## Зміст

---

### Математика

- Золотарев В. А.* Обратная задача для оператора Штурма–Лиувилля с нелокальным потенциалом ..... 7
- Кінаш О. М., Пароля М. І., Шеремета М. М.* Зростання характеристичних функцій ймовірнісних законів ..... 13
- Курдаченко Л. А., Муньоз-Есколано Х. М., Турбай Н. А.* Спряжено-переставні підгрупи деяких нескінченних груп ..... 18
- Подлевський Б. М., Хлобистов В. В.* Градієнтний метод розв'язування нелінійних багатопараметричних спектральних задач ..... 22

### Інформатика та кібернетика

- Дейнека В. С.* Оптимальное управление нестационарным тепловым процессом и идентификация параметров среды при известных тепловых потоках ..... 28
- Литвин О. М., Нечуйвітер О. П.* Наближене обчислення коефіцієнтів Фур'є функцій трьох змінних з використанням сплайн-інтерфлетадії на класі диференційовних функцій ..... 36
- Ляшко С. І., Кмошин Д. А., Стешенко Г. М.* Якісне та чисельне дослідження сингулярного керування конвективною дифузією суміші радіоізотопів ..... 42

### Механіка

- Мартынюк А. А., Мартынюк-Черниенко Ю. А.* О робастной устойчивости импульсных систем с последствием ..... 47
- Поляков В. Л.* К расчету коэффициента фильтрации суффозионных грунтов ..... 54
- Шевченко В. П., Алтухов Е. В., Фоменко М. В.* Деформация трехслойных пластин со скользящей заделкой торцов и несовершенным контактом слоев ..... 61

### Фізика

- Герасимов О. І., Вандевалле Н.* Щодо точних розв'язків задачі про перенесення імпульсу у неоднорідному гранульованому ланцюжку ..... 67

### Теплофізика

- Слесаренко А. П., Сорока О. С.* Термостабілізація підлог приміщень з максимальним акумулюванням тепла ..... 73

### Науки про Землю

- Іванов В. А., Овчаренко І. А., Прусов А. В., Шокуров М. В.* Моделирование катастрофических паводков в регионе Южного берега Крыма ..... 79

Семененко В. П., Гіріч А. Л., Кичань Н. В. Тонкозернистий ксеноліт AL1 у хондриті Allende (CV3): мінералогія та походження ..... 85

Усенко О. В. Умови метаморфізму та гранітизації порід Українського щита ..... 93

## Хімія

Никовская Г. Н., Годинчук Н. В., Керносенко Л. А., Самченко Ю. М., Ульберг З. Р. Искусственные почвы на основе акриловых гидрогелей ..... 97

Тітов Ю. О., Білявіна Н. М., Марків В. Я., Слободяник М. С., Полубінський В. В. Кристалічна структура  $Sr_3LaNb_3O_{12}$  ..... 102

Щербина М. Г., Костюк О. В., Іщенко М. В., Куліченко С. А. Комплексне використання катіонної поверхнево-активної речовини для визначення залишкових кількостей міді на поверхнях ..... 109

## Біологія

Гольцев А. М., Сафранчук О. В., Бондарович М. О., Останков М. В., Бабенко Н. М., Гаєвська Ю. О., Челомбітько О. В. Методичні підходи до стабілізації структурного і функціонального станів кріоконсервованих клітин аденокарциноми Ерліха ..... 115

Гришко В. М., Піскова О. М. Процеси пероксидного окиснення ліпідів та зміни кількісного і якісного складу поверхневих ліпідів у *Populus italica* (Du Roi) Moench, *Populus deltoides* Marsh. та *Aesculus hippocastanum* L. за різного рівня забруднення важкими металами ..... 123

Ковальова І. М., Тараборкін Л. А. Морфоекологічні особливості будови діафрагми кажанів (Chiroptera; Vespertilionidae, Rhinolophidae) ..... 131

Харчук І. В., Столяр О. А., Островська Г. В., Рибальченко В. К. Порівняння стану міокарда під впливом нової цитостатичної сполуки похідного дигідропіролу і 5-фторурацилу ..... 136

## Біохімія

Гурмач В. В., Балинський О. М., Бориско П. О., Платонов М. О., Баєнз Г. Х., Ковальський Д. Б., Прилуцький Ю. І. Пошук низькомолекулярних лігандів для SH2-доменів методом докінгу міжмолекулярних взаємодій ..... 141

Чернишенко В. О., Макогоненко Є. М., Луговської Е. В., Чернишенко Т. М., Платонова Т. М., Михаловська Л. І., Комісаренко С. В. Кінетика гідролізу  $V\beta$ -ланцюга молекули фібриногену, мономерного та полімерного фібрину desA фібриногеназою з отрути *Echis multisquamatis* ..... 147

## Біофізика

Жураківський Р. О. Система внутрішньомолекулярних водневих зв'язків, що стабілізують конформери 2'-дезоксиксантиозину ..... 154

## Медицина

*Колесник Ю. М., Чекман І. С., Яковлева І. Ю., Беленічев І. Ф., Абрамов А. В., Горчакова Н. О.* Порівняльний аналіз впливу таурину і пірацетаму на морфологічні зміни головного мозку щурів при циркуляторній гіпоксії ..... 160

*Пілінська М. А., Дибський С. С., Дибська О. Б., Швайко Л. І., Сушко В. О.* Реалізація прихованої хромосомної нестабільності в лімфоцитах периферичної крові учасників ліквідації аварії на Чорнобильській АЕС, хворих на рак легенів ..... 166

## Екологія

*Гончарук В. В., Савлук О. С., Саприкіна М. М., Руденко А. В.* Технологія очистки води від мікроміцетів ..... 172

## Contents

---

### Mathematics

*Zolotarev V. A.* An inverse problem for the Sturm–Liouville operator with nonlocal potential 7

*Kinash O. M., Parolya M. I., Sheremeta M. M.* A growth of the characteristic functions of probability laws ..... 13

*Kurdachenko L. A., Munoz-Escolano J. M., Turbay N. A.* Conjugate-permutable subgroups in some infinite groups ..... 18

*Podlevskiy B. M., Khlobystov V. V.* A gradient method for solving the nonlinear multi-parameter spectral problems ..... 22

### Information Science and Cybernetics

*Deineka V. S.* Optimal control over the unsteady thermal process and identification of parameters of a medium at the known heat flows ..... 28

*Lytvyn O. N., Nechviviter O. P.* The approximate calculation of 3D Fourier coefficients of the functions of three variables by using the spline-interflatation on a class of differentiable functions ..... 36

*Lyashko S. I., Klyushin D. A., Steshenko G. M.* The qualitative numerical investigation of the singular control over the convection-diffusion of a radioisotope mixture ..... 42

### Mechanics

*Martynyuk A. A., Martynyuk-Chernienko Yu. A.* On the robust stability of impulsive systems with delay ..... 47

*Polyakov V. L.* On the calculation of the non-cohesion soil hydraulic conductivity ..... 54

<i>Shevchenko V. P., Altukhov E. V., Fomenko M. V.</i> Deformation of three-layer plates with the sliding clamping of ends and the incomplete contact of layers .....	61
<b>Physics</b>	
<i>Gerasyimov O. I., Vanderwalle N.</i> On the exact solutions of the problem of impulsive propagation in an inhomogeneous granular chain .....	67
<b>Heat physics</b>	
<i>Slesarenko A. P., Soroka A. S.</i> Thermostabilization of premises' floor with maximum heat accumulation .....	73
<b>Geosciences</b>	
<i>Ivanov V. A., Ovcharenko I. A., Prusov A. V., Shokurov M. V.</i> Modeling of extreme flood flows on the South coast of the Crimea .....	79
<i>Semenenko V. P., Girich A. L., Kychan N. V.</i> Fine-grained xenolith AL1 in chondrite Allende (CV3): mineralogy and origin .....	85
<i>Usenko O. V.</i> The conditions of metamorphism and granitization of rocks of the Ukrainian shield .....	93
<b>Chemistry</b>	
<i>Nicovskaya G. N., Godinchuk N. V., Kernosenko L. A., Samchenko J. M., Ulberg Z. R.</i> Artificial soils based on acrylic hydrogels .....	97
<i>Titov Y. A., Belyavina N. M., Markiv V. Ya., Slobodyanik M. S., Polubinsky V. V.</i> Crystal structure of $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ .....	102
<i>Shcherbyna M. G., Kostyuk O. V., Ishchenko M. V., Kulichenko S. A.</i> Multipurpose use of cationic surfactant for the determination of copper residual quantities on the surfaces .....	109
<b>Biology</b>	
<i>Goltsev A. N., Safranchuk O. V., Bondarovich N. A., Ostankov M. V., Babenko N. N., Gaevskaya Yu. A., Chelombitko O. V.</i> Methodological approaches to the stabilization of structural and functional states of Ehrlich adenocarcinoma cryopreserved cells .....	115
<i>Gryshko V. M., Piskova O. M.</i> Processes of lipids peroxidation and change of the quantitative and qualitative compositions of superficial lipids at <i>Populus italica</i> (Du Roi) Moench, <i>Populus deltoids</i> Marsh. and <i>Aesculus hippocastanum</i> L. at different levels of contamination by heavy metals .....	123
<i>Kovalyova I. M., Taraborkin L. A.</i> The morphoecological features of the structure of bats' (Chiroptera; Vespertilionidae, Rhinolophidae) diaphragm .....	131
<i>Kharchuk I. V., Stoliar O. A., Ostrovska G. V., Rybalchenko V. K.</i> Comparison of myocardium status under the influence of novel cytostatic compound dihydropyrrole derivate and 5-fluorouracil .....	136

## Biochemistry

*Hurmach V. V., Balynskyi A. M., Borysko P. O., Platonov M. O., Baeng G. H., Kovalskyy D. B., Prylutskyi Yu. I.* Search for low-molecular ligands for SH2-domains by the docking method of intermolecular interactions ..... 141

*Chernyshenko V. O., Makogonenko E. M., Lugovskoi E. V., Chernyshenko T. M., Platonova T. M., Mikhalovska L. I., Komisarenko S. V.* Kinetics of fibrinogen, monomeric and polymerized fibrin desA B $\beta$ -chain hydrolysis by *Echis multisquamatis* venom fibrinogenase ..... 147

## Biophysics

*Zhurakivsky R. O.* System of intramolecular hydrogen bonds stabilizing 2'-deoxyxantossine conformers ..... 154

## Medicine

*Kolesnik Yu. M., Chekman I. S., Yakovleva I. Yu., Belenichev I. F., Abramov A. V., Gorchakova N. A.* Comparative analysis of the influence of taurine and piracetam on the morphological changes in rats' brain with circulatory hypoxia ..... 160

*Pilinskaya M. A., Dibskiy S. S., Dibskaya Ye. B., Shvayko L. I., Sushko V. A.* Realization of hidden chromosome instability in peripheral blood lymphocytes of the Chernobyl accident clean-up workers with lung cancer ..... 166

## Ecology

*Goncharuk V. V., Savluk O. S., Saprykina M. N., Rudenko A. V.* A technology of water purification from microscopic fungi ..... 172

Редактори розділів

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

Оформлення художника В. Г. Самсонова

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

Видавничий дім «Академперіодика»

Свідоцтво про внесення до Держреєстру суб'єкта видавничої справи

серії ДК № 544 від 27.07.2001

01004, Київ, вул. Терещенківська, 4

---

Підписано до друку 07.08.2012. Формат 84×108/16. Ум. друк. арк. 18,48. Обл.-вид. арк. 16.

Тираж 266 прим. Зам. 3361. Ціна 25 грн.

---

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



УДК 517.948

© 2012

В. А. Золотарев

## Обратная задача для оператора Штурма–Лиувилля с нелокальным потенциалом

(Представлено академиком НАН Украины В. А. Марченко)

Осуществлен спектральный анализ самосопряженного интегро-дифференциального оператора, который является одномерным возмущением оператора второй производной на конечном интервале. Описан спектр этого оператора и решена обратная спектральная задача, которая позволяет по двум спектрам найти соответствующее возмущение.

В данной работе изучаются прямая и обратная задачи для оператора  $-d/dx^2 + K$ , где  $K$  — произвольный самосопряженный одномерный оператор.

**1. Характеристическая функция.** Обозначим через  $L_0$  действующий в пространстве  $L^2_{(0,\pi)}$  самосопряженный оператор

$$L_0 y(x) = -y''(x), \quad (1)$$

область определения которого состоит из дважды дифференцируемых функций, удовлетворяющих краевым условиям  $y(0) = 0$ ,  $y(\pi) = 0$ . Рассмотрим самосопряженный интегро-дифференциальный оператор [1]

$$Ly(x) = L_0 y(x) + \alpha \langle y, v \rangle v = -y''(x) + \alpha \int_0^\pi \overline{v(t)} v(x) y(t) dt. \quad (2)$$

Область определения оператора  $L$  совпадает с областью определения оператора  $L_0$ , а  $\alpha = \pm 1$  и  $v(x)$  — комплекснозначная функция из  $L^2_{(0,\pi)}$ . Решение  $u(x, z)$  уравнения  $Lu = zu$ , удовлетворяющее краевому условию  $u(0, z) = 0$ , имеет вид

$$u(x, z) = a(\lambda) \frac{\sin \lambda x}{\lambda} + \alpha b(\lambda) \int_0^x \frac{\sin \lambda(x-t)}{\lambda} v(t) dt, \quad (3)$$

где  $z = \lambda^2$ ,  $a(\lambda)$  — произвольная функция от  $\lambda$ , а

$$b(\lambda) = \int_0^{\pi} u(x, \lambda) \overline{v(x)} dx. \quad (4)$$

Умножив (3) на  $\overline{v(x)}$  и проинтегрировав от 0 до  $\pi$ , получим

$$a(\lambda) \frac{\overline{\tilde{v}(\lambda)} - \overline{\tilde{v}(-\lambda)}}{2i\lambda} - b(\lambda) \left( 1 - \alpha \int_0^{\pi} \int_0^x \frac{\sin \lambda(x-t)}{\lambda} v(t) dt \overline{v(x)} dx \right) = 0, \quad (5)$$

где через

$$\tilde{v}(\lambda) = \int_0^{\pi} e^{-i\lambda x} v(x) dx \quad (6)$$

обозначено преобразование Фурье функции  $v(x)$ . Так как

$$\int_0^{\pi} \int_0^x \frac{\sin \lambda(x-t)}{\lambda} v(t) dt \overline{v(x)} dx = \frac{\overline{\phi(\lambda)} - \overline{\phi(-\lambda)}}{2i\lambda},$$

где

$$\phi(\lambda) = \int_0^{\pi} e^{-i\lambda x} v(x) \int_0^x e^{i\lambda t} \overline{v(t)} dt dx, \quad (7)$$

то равенство (5) можно переписать так:

$$a(\lambda) \frac{\overline{\tilde{v}(\lambda)} - \overline{\tilde{v}(-\lambda)}}{2i\lambda} - \frac{b(\lambda)}{2i\lambda} (2i\lambda - \overline{\alpha\phi(\lambda)} + \overline{\alpha\phi(-\lambda)}) = 0. \quad (8)$$

Из краевого условия  $u(\pi, z) = 0$  следует

$$a(\lambda) \frac{\sin \pi \lambda}{\lambda} + \alpha b(\lambda) \int_0^{\pi} \frac{\sin \lambda(\pi-t)}{\lambda} v(t) dt = 0. \quad (9)$$

Система линейных уравнений (8), (9) относительно  $a(\lambda)$  и  $b(\lambda)$  имеет нетривиальное решение, если ее определитель

$$\Delta(\lambda) = \frac{\sin \pi \lambda}{2i\lambda^2} (2i\lambda - \overline{\alpha\phi(\lambda)} + \overline{\alpha\phi(-\lambda)}) + \alpha \frac{\overline{\tilde{v}(\lambda)} - \overline{\tilde{v}(-\lambda)}}{2i\lambda} \int_0^{\pi} \frac{\sin \lambda(\pi-t)}{\lambda} v(t) dt \quad (10)$$

равен нулю. Интегрируя по частям выражение  $\phi(\lambda)$  (7), имеем

$$\phi(\lambda) + \overline{\phi(\lambda)} = \tilde{v}(\lambda) \overline{\tilde{v}(\lambda)}. \quad (11)$$



С учетом (11) получим представление для  $\Delta(\lambda)$  (10)

$$\begin{aligned} \Delta(\lambda) = & -\frac{e^{i\lambda\pi}}{4\lambda^2} [2i\lambda + \alpha(\phi(\lambda) + \overline{\phi(-\bar{\lambda})} - \tilde{v}(\lambda)\overline{\tilde{v}(-\bar{\lambda})})] + \\ & + \frac{e^{-i\lambda\pi}}{4\lambda^2} [2i\lambda + \alpha(\tilde{v}(-\lambda)\overline{\tilde{v}(\bar{\lambda})} - \phi(-\lambda) - \overline{\phi(\bar{\lambda})})]. \end{aligned} \quad (12)$$

Если  $\lambda$  является нулем функции  $\Delta(\lambda)$  (12), то  $z = \lambda^2$  есть собственное число оператора  $L$  (2). Поэтому функцию  $\Delta(\lambda)$  будем называть *характеристической функцией оператора  $L$*  (2).

**2. Резольвента оператора  $L$ .** Резольвента  $R(z) = (L - zI)^{-1}$  оператора  $L$  (2) выражается через резольвенту  $R_0(z) = (L_0 - zI)^{-1}$  оператора  $L_0$  (1) формулой

$$R(z)f = R_0(z)f - \alpha \frac{\langle R_0(z)f, v \rangle}{1 + \alpha \langle R_0(z)v, v \rangle} R_0(z)v. \quad (13)$$

Резольвента  $R_0(\lambda^2)$  имеет вид [2]

$$(R_0(\lambda^2)f)(x) = \frac{1}{\lambda \sin \pi \lambda} \left\{ \sin \lambda(\pi - x) \int_0^x \sin \lambda t f(t) dt + \sin \lambda x \int_x^\pi \sin \lambda(\pi - t) f(t) dt \right\}. \quad (14)$$

Используя (13) и опуская выкладки, можно доказать формулу

$$\Delta(\lambda) = \frac{\sin \pi \lambda}{\lambda} (1 + \alpha \langle R_0(\lambda^2)v, v \rangle). \quad (15)$$

Из соотношения (15) следует, что  $\Delta(\lambda)$  (12) является целой функцией экспоненциального типа, который равен  $\pi$ . Для этого следует заметить, что  $(\sin \pi \lambda)/\lambda$  имеет экспоненциальный тип  $\pi$ , выражение  $|((\sin \pi \lambda)/\lambda) \langle R_0(\lambda^2)v, v \rangle|$  ограничено на  $\mathbb{R}$ , а на любой окружности  $C_R = \{\lambda: |\lambda| = R\}$  оценивается сверху  $ae^{\pi R}$  (где  $a$  — константа).

Спектр оператора  $L_0$  (1) дискретен,  $\sigma_0 = \{n^2: n \in \mathbb{N}\}$ , а его ортонормированные собственные функции равны  $u_n(x) = \sqrt{2/\pi} \sin nx$ . Отсюда вытекает

$$1 + \alpha \langle R_0(z)v, v \rangle = 1 + \alpha \sum_k \frac{|v_k|^2}{k^2 - z}, \quad (16)$$

где  $v_k = \langle v, u_k \rangle$  — синус-коэффициенты Фурье функции  $v(x)$ . С учетом (15), (16) получим утверждение.

**Лемма 1.** *Для характеристической функции  $\Delta(\lambda)$  (12) справедливо представление*

$$\frac{\sin \lambda \pi}{\lambda} \left( 1 + \alpha \sum_k \frac{|v_k|^2}{k^2 - \lambda^2} \right) = \Delta(\lambda), \quad (17)$$

где  $v_k$  — синус-коэффициенты Фурье функции  $v(x)$ .

**3. Обратная задача.** Обозначим через  $\Lambda = \{\lambda_k\}$  множество нулей функции  $\Delta(\lambda)$  (12). Используя разложение в бесконечное произведение [3] целой функции экспоненциального типа  $\Delta(\lambda)$  и  $\sin \lambda \pi$ , запишем формулу (17) в виде

$$1 + \alpha \sum_k \frac{|v_k|^2}{k^2 - \lambda^2} = -\frac{C \prod_{\lambda_k \in \Lambda} \left( 1 - \frac{\lambda^2}{\lambda_k^2} \right)}{4\pi \prod_{k \in \mathbb{N}} \left( 1 - \frac{\lambda^2}{k^2} \right)}, \quad (18)$$

где  $C$  — константа, а произведение в числителе берется с учетом кратности корней  $\lambda_k$ . Подставив в (18)  $\lambda^2 = iy$  и устремив  $y$  к бесконечности, найдем  $C = -4\pi \prod_k (\lambda_k/k)^2$ . После вычисления вычета в обеих частях равенства (18) в точке  $\lambda = n$  и с учетом найденного значения  $C$  имеем

$$\alpha |v_n|^2 = (\lambda_n^2 - n^2) \prod_{k \neq n} \frac{\lambda_k^2 - n^2}{k^2 - n^2}. \quad (19)$$

Отсюда следует

**Теорема 1.** По спектру  $\sigma(L) = \{\lambda_n^2\}$  оператора  $L$  (2) (с учетом кратностей  $\lambda_n^2$ ) однозначно восстанавливаются число  $\alpha$  ( $= \pm 1$ ) и квадраты модулей  $|v_n|^2$  синус-коэффициентов Фурье  $v_n$  функции  $v(x)$ .

Пусть

$$v_\varphi(x) = \sum_k |v_k| e^{i\varphi_k} u_k(x), \quad (20)$$

где  $\varphi_k$  — произвольные числа из  $[0, 2\pi]$  ( $k \in \mathbb{N}$ ). Из теоремы 1 следует, что оператор  $L_\varphi$  вида (2), у которого  $\alpha$  такое же, как у  $L$  (2), а  $v_\varphi(x)$  равна (20), имеет спектр, совпадающий со спектром  $L$ :  $\sigma(L_\varphi) = \sigma(L)$ . Укажем способ однозначного нахождения  $v(x)$ . Рассмотрим операторы  $L_\pm$  вида (2), у которых  $\alpha_\pm = \alpha$  и

$$v_\pm(x) = v(x) \pm h(x), \quad (21)$$

где  $h(x)$  вещественна и принадлежит  $L^2_{(0,\pi)}$ . Из теоремы 1 вытекает, что по спектрам  $\sigma(L_-)$  и  $\sigma(L_+)$  мы можем найти

$$\begin{aligned} |v_+(n)|^2 &= |v_n|^2 + 2 \operatorname{Re} v_n h_n + |h_n|^2, \\ |v_-(n)|^2 &= |v_n|^2 - 2 \operatorname{Re} v_n h_n + |h_n|^2, \end{aligned} \quad (22)$$

где  $v_\pm(n)$  и  $h_n$  — синус-коэффициенты Фурье-функций  $v_\pm(x)$  (21) и  $h(x)$ . В случае вещественности  $v(x)$  из системы уравнений (22) мы однозначно находим числа  $v_n$ , в предположении, что коэффициенты Фурье  $h_n$  заданной функции  $h(x)$  отличны от нуля. В частности, если  $h(x) = x$ , то  $h_n = \frac{\pi}{n}(-1)^{n+1}$  и из (22) получим  $4\pi v_n = n(-1)^{n+1}(|v_+(n)|^2 - |v_-(n)|^2)$ .

**Теорема 2.** Пусть заданы два оператора  $L_+$  и  $L_-$  вида (2), у которых  $\alpha_\pm = \alpha$  ( $= \pm 1$ ), функция  $v(x)$  вещественна, а  $v_\pm(x)$  заданы формулами (21), где  $h(x)$  — известная вещественная функция из  $L^2_{(0,\pi)}$  с ненулевыми синус-коэффициентами Фурье. Тогда по спектрам  $\sigma(L_+)$ ,  $\sigma(L_-)$  (с учетом их кратностей) операторов  $L_+$ ,  $L_-$  функция  $v(x)$  определяется единственным образом.

В случае комплекснозначности  $v(x)$  наряду с  $L_+$  и  $L_-$  следует также рассмотреть оператор  $L_i$  вида (2), у которого  $\alpha_i = \alpha$ , а

$$v_i(x) = v(x) + ih(x), \quad (23)$$

где  $h(x)$  вещественна и совпадает с  $h(x)$  в (21). Тогда по спектру  $\sigma(L_i)$  в силу теоремы 1 найдем

$$|v_i(n)|^2 = |v_n|^2 + 2 \operatorname{Im} v_n \cdot h_n + |h_n|^2. \quad (24)$$

Из (22), (24) вытекает, что по спектрам  $\sigma(L_+)$ ,  $\sigma(L_-)$ ,  $\sigma(L_i)$  операторов  $L_+$ ,  $L_-$ ,  $L_i$  вида (2), где  $\alpha_+ = \alpha_- = \alpha_i = \alpha$  ( $= \pm 1$ ), а  $v_{\pm}(x)$  и  $v_i(x)$  заданы формулами (21), (23), однозначно находится функция  $v(x)$ , при условии, что  $h(x)$  — известная вещественная функция из  $L^2_{(0,\pi)}$  с ненулевыми синус-коэффициентами Фурье.

**4. Спектр оператора  $L$ .** Используя формулу (11) и представление (12) для  $\Delta(\lambda)$ , получим

$$\Delta(n) = \frac{(-1)^{n+1}\alpha}{n^2} |v_n|^2. \quad (25)$$

Из (17) следует, что нули  $\lambda_k$  функции  $\Delta(\lambda)$  принадлежат: либо нулям  $(\sin \pi \lambda)/\lambda$ ; либо нулям функции  $1 + \alpha \langle R_0(\lambda^2)v, v \rangle$ ; либо являются нулями  $(\sin \pi \lambda)/\lambda$  и  $1 + \alpha \langle R_0(\lambda^2)v, v \rangle$  одновременно. С учетом (25) имеем, что  $\lambda_n = n \in \mathbb{N}$  в том и только в том случае, если  $v_n = 0$ . Обозначим через  $N_1$  подмножество из  $\mathbb{N}$ ,

$$N_1 = \{n \in \mathbb{N} : v_n = 0\}. \quad (26)$$

Пусть  $N_2 = \mathbb{N} \setminus N_1 = \{n \in \mathbb{N} : v_n \neq 0\}$ . Из (16) следует, что нули  $\mu_k$  функции  $1 + \alpha \langle R_0(z)v, v \rangle$  вещественные, простые и перемежаются с числами  $n^2$ , где  $n^2 \in N_2$ . Определим множества

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \{\lambda_k^2 : \lambda_k^2 = n^2, n \in N_1; n \neq \mu_k \forall k\}, \\ \sigma_2 &= \{\lambda_k^2 = \mu_k : \exists n \in N_1, \mu_k = n\}, \\ \sigma_3 &= \{\lambda_k^2 = \mu_k : \mu_k \neq n, \forall n \in N_1\}, \end{aligned} \quad (27)$$

тогда спектр оператора  $L$  (2) представляет собой объединение непересекающихся множеств,

$$\sigma(L) = \sigma_1 \cup \sigma_2 \cup \sigma_3. \quad (28)$$

Спектр, отвечающий  $\sigma_1$  и  $\sigma_3$ , простой, а соответствующие функции оператора  $L$  равны

$$\begin{aligned} u(x, \lambda_n) &= \sin \lambda_n x \quad (\lambda_n \in \sigma_1), \\ \hat{u}(x, \lambda_n) &= \sum_{k \in N_2} \frac{v_k}{k^2 - \lambda_n^2} \sin kx \quad (\lambda_n \in \sigma_3). \end{aligned} \quad (29)$$

Компоненте  $\sigma_2$  (27) отвечает двукратный спектр, при этом собственные функции  $u(x, \lambda_n)$  и  $\hat{u}(x, \lambda_n)$  имеют вид (29), где  $\lambda_n \in \sigma_2$ .

1. Хейне В., Коэн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. — Москва: Мир, 1973. — 557 с.
2. Левитан Б. М. Обратные задачи Штурма–Лиувилля. — Москва: Наука, 1984. — 240 с.
3. Levin В. Ya. Lectures on entire functions // Transl. Math. Monogr. Vol. 150. — Providence, RI: Amer. Math. Soc., 1996. — 248 p.

Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б. І. Веркина НАН України, Харків  
Харківський національний університет ім. В. Н. Каразіна

Поступило в редакцію 21.12.2011

**В. О. Золотарьов**

**Обернена задача для оператора Штурма–Ліувілля з нелокальним потенціалом**

*Здійснено спектральний аналіз самоспряженого інтегро-диференціального оператора, який є одновимірним збуренням оператора другої похідної на скінченному інтервалі. Описано спектр цього оператора та розв'язано обернену спектральну задачу, що дозволяє по двох спектрах знайти відповідне збурення.*

**V. A. Zolotarev**

**An inverse problem for the Sturm–Liouville operator with non-local potential**

*Spectral analysis of a self-adjoint integro-differential operator, which is a one-dimensional perturbation of the second derivative operator on a finite interval, is realized. Spectrum of this operator is described, and the inverse spectral problem is solved allowing us to find the corresponding perturbation from two spectra.*

О. М. Кінаш, М. І. Пароля, М. М. Шеремета

## Зростання характеристичних функцій ймовірнісних законів

*(Представлено академіком НАН України В. С. Королюком)**Для аналітичних у крузі характеристичних функцій ймовірнісних законів у термінах узагальнених порядків встановлено зв'язок між зростанням максимуму модуля і спаданням суми "хвостів" ймовірнісного закону.*

Неспадна неперервна зліва на  $(-\infty, +\infty)$  функція  $F$  називається [1, с. 10] ймовірнісним законом, якщо  $\lim_{x \rightarrow +\infty} F(-x) = 0$  і  $\lim_{x \rightarrow +\infty} F(x) = 1$ , а характеристичною функцією закону  $F$  називається [1, с. 12] функція

$$\varphi(z) = \varphi(z; F) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{izx} dF(x), \quad z \in (-\infty, +\infty). \quad (1)$$

Якщо функція  $\varphi$  допускає аналітичне продовження на круг  $\mathbb{D}_R = \{z: |z| < R\}$ ,  $0 < R \leq +\infty$ , то вона називається аналітичною в  $\mathbb{D}_R$ . Надалі вважатимемо, що  $\mathbb{D}_R$  є найбільшим кругом аналітичності функції  $\varphi$ . Відомо [1, с. 37–38], що для того щоб характеристична функція  $\varphi$  була аналітичною в  $\mathbb{D}_R$ , необхідно і достатньо, щоб для кожного  $r \in [0, R)$

$$W_F(x) =: 1 - F(x) + F(-x) = O(e^{-rx}), \quad x \rightarrow +\infty. \quad (2)$$

Якщо  $R = +\infty$  (тобто  $\varphi$  — ціла характеристична функція) і  $\varphi(z) \not\equiv \text{const}$ , то [1, с. 45] існує скінченна чи нескінченна границя  $\lim_{r \rightarrow +\infty} r^{-1} \ln M(r, \varphi) > 0$ , де  $M(r, \varphi) = \max\{|\varphi(z)|: |z| = r\}$ . Тому якщо  $\rho[\varphi] = \overline{\lim}_{r \rightarrow +\infty} (\ln \ln M(r, \varphi) / \ln r)$  — порядок функції  $\varphi$  і  $\sigma[\varphi] = \overline{\lim}_{r \rightarrow +\infty} (\ln M(r, \varphi) / r^{\rho[\varphi]})$  — її тип, визначений за умови  $0 < \rho[\varphi] < +\infty$ , то або  $\rho[\varphi] > 1$ , або  $\rho[\varphi] = 1$  і  $\sigma[\varphi] > 0$ . Б. Рамачандран [2] (див. також [1, с. 54]) показав, що за умови  $1 \leq \rho[\varphi] < +\infty$  правильна формула

$$\frac{1}{\rho[\varphi]} + \frac{1}{\gamma[F]} = 1, \quad \gamma[F] = \underline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\ln \ln(1/W_F(x))}{\ln x}, \quad (3)$$

а за умови  $1 < \rho[\varphi] < +\infty$

$$(\gamma[F]\delta[F])^{\rho[\varphi]-1} \sigma[\varphi]\rho[\varphi] = 1, \quad \delta[F] = \underline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} x^{-\gamma[F]} \ln \frac{1}{W_F(x)}. \quad (4)$$

Н. І. Яковлева [3, 4] узагальнила формулу (3), використовуючи узагальнені порядки [5]. Як і в [5], через  $L$  позначимо клас неперервних додатних на  $(-\infty, +\infty)$  функцій  $\alpha$  таких, що  $\alpha(x) \equiv \alpha(x_0) > 0$  для  $x \leq x_0$  і  $\alpha(x) \uparrow +\infty$  при  $x_0 \leq x \rightarrow +\infty$ . Будемо говорити, що

$\alpha \in L^0$ , якщо  $\alpha \in L$  і  $\alpha((1+o(1))x) = (1+o(1))\alpha(x)$  при  $x \rightarrow +\infty$ . Нарешті,  $\alpha \in L_{\text{пз}}$ , якщо  $\alpha \in L$  і  $\alpha(cx) = ((1+o(1)))\alpha(x)$   $x \rightarrow +\infty$  для кожного  $c \in (0, +\infty)$ , тобто  $\alpha$  — повільно зростаюча функція. В [4] доведено, що якщо  $\alpha \in L_{\text{пз}}$  і  $\beta \in L^0$ , то для того щоб  $\overline{\lim}_{r \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta(r)} \alpha\left(\frac{1}{r} \ln M(r, \varphi)\right) = \gamma > 0$ , необхідно і достатньо, щоб  $\overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{1}{\alpha(x)} \beta\left(\frac{1}{x} \ln \frac{1}{W_F(x)}\right) = \frac{1}{\gamma}$ .

Оскільки універсальної шкали зростання побудувати не можна, Б.В. Винницький [6] встановив зв'язок між зростанням  $M(r, \varphi)$  і спаданням  $W_F(x)$  для цілих функцій у термінах функції  $\Phi^{-1}(x)$ , оберненої до функції  $\Phi(x) = \ln M(e^x, \varphi)$ . Він показав, що якщо  $\varphi$  має нескінченний порядок, то  $\overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\Phi^{-1}(x)}{\ln((1/x) \ln(1/W_F(x)))} = 1$ . М. Девес [7] замість функцій з класів  $L^0$  і  $L_{\text{пз}}$  розглядала функції  $\alpha$  і  $\beta$  такі, що  $\overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\alpha(kx)}{\alpha(x)} \leq A_0 k^a$  і  $\overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\beta(kx)}{\beta(x)} \leq B_0 k^b$  для  $k > 1$ , де  $a, b, A_0, B_0$  — додатні сталі і, зрозуміло, замість рівностей отримала оцінки  $\overline{\lim}_{r \rightarrow +\infty} \frac{1}{\beta(r)} \alpha\left(\frac{\ln M(r, \varphi)}{r}\right)$  зверху і знизу через  $\overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\alpha(x)}{\beta((1/x) \ln(1/W_F(x)))}$ .

Для аналітичної в одиничному крузі  $\mathbb{D}_1$  функції  $\varphi$  порядок і тип вводяться за формулами  $\rho^*[\varphi] = \overline{\lim}_{r \uparrow 1} \frac{\ln^+ \ln^+ M(r, \varphi)}{-\ln(1-r)}$  і  $\sigma^*[\varphi] = \overline{\lim}_{r \uparrow 1} (1-r)^{\rho^*[\varphi]} \ln^+ M(r, \varphi)$  за умови  $0 < \rho^*[\varphi] < +\infty$ . В.М. Сороківський [8] довів, що якщо  $\varphi$  — аналітична в  $\mathbb{D}_1$  характеристична функція ймовірного закону  $F$ , то

$$\frac{1}{\gamma^*[F]} - \frac{1}{\rho^*[F]} = 1, \quad \gamma^*[F] = \overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\ln^+ \left(1 - \ln \frac{1}{W_F(x)}\right)}{\ln x}, \quad (5)$$

і

$$(\gamma^*[F] \delta^*[F])^{\rho^*[\varphi]+1} = \sigma^*[\varphi] \rho^*[\varphi], \quad \delta^*[F] = \overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} x^{-\gamma^*[F]} \left(x - \ln \frac{1}{W_F(x)}\right)^+. \quad (6)$$

В [9] він показав, що якщо  $\alpha \in L_{\text{пз}}$  і  $\beta \in L_{\text{пз}}$  такі, що  $\overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{d \ln \beta^{-1}(c\alpha(x))}{d \ln x} < 1$ ,  $\overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\alpha(x\alpha^{-1}(c\beta(x)))}{\beta(x)} = c$  і  $\beta^{-1}\left(c\alpha\left(\frac{x}{\beta^{-1}(c\alpha(x))}\right)\right) = (1+o(1))\beta^{-1}(c\alpha(x))$  при  $x \rightarrow +\infty$  для кожного  $c \in (0; +\infty)$ , то

$$\overline{\lim}_{r \uparrow 1} \frac{\alpha(\ln M(r, \varphi))}{\beta\left(\frac{1}{1-r}\right)} = \overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\alpha(x)}{\beta\left(\left(1/\left(1 - \frac{1}{x} \ln \frac{1}{W_F(x)}\right)\right)^+\right)}. \quad (7)$$

Тут ми доповнимо та узагальнимо вищенаведені результати. Для цілих характеристичних функцій правильна така теорема.

**Теорема 1.** *Якщо або  $\alpha \in L_{\text{пз}}$  і  $\beta \in L^0$ , або  $\alpha \in L^0$  і  $\beta \in L_{\text{пз}}$ , а  $\varphi$  — ціла характеристична функція ймовірного закону  $F$ , то*

$$\overline{\lim}_{r \rightarrow +\infty} \frac{\alpha\left(\frac{1}{r} \ln M(r, \varphi)\right)}{\beta(r)} = \overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\alpha(x)}{\beta\left(\frac{1}{x} \ln \frac{1}{W_F(x)}\right)}. \quad (8)$$

За умов  $\alpha \in L_{\text{пз}}$  і  $\beta \in L^0$  теорема 1 збігається з наведеним вище результатом Н. І. Яковлевої [4], який вказує на зв'язок між зростанням  $M(r, \varphi)$  і спаданням  $W_F(x)$  у випадку, коли  $(1/r) \ln M(r, \varphi)$  прямує до  $+\infty$  досить швидко. За умов  $\alpha \in L^0$  і  $\beta \in L_{\text{пз}}$  теорема 1 є новим результатом і вказує на такий зв'язок, коли  $(1/r) \ln M(r, \varphi)$  прямує до  $+\infty$  повільно. Якщо виберемо  $\alpha(x) = \beta(x) = \ln x$ , для  $x \geq x_0$ , то з (8) отримуємо формулу (3) для знаходження порядку.

Для знаходження типу цілої характеристичної функції ймовірнісного закону  $F$  правильна така рівність:

$$\overline{\lim}_{r \rightarrow +\infty} \frac{\ln M(r, \varphi)}{r^\rho} = \frac{\rho - 1}{\rho^\rho} \overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{x}{\left(\frac{1}{x} \ln \frac{1}{W_F(x)}\right)^{\rho-1}}, \quad \rho = \rho[\varphi],$$

з якої випливає формула (4). У випадку, коли характеристична функція  $\varphi$  ймовірнісного закону  $F$  аналітична у крузі  $\mathbb{D}_R$ ,  $0 < R < +\infty$ , ситуація дещо інша, бо  $\varphi$  може бути обмеженою в  $\mathbb{D}_R$ , а для того щоб  $M(r, \varphi) \uparrow +\infty$  при  $r \uparrow R$ , достатньо, щоб

$$\overline{\lim}_{r \uparrow R} W_F(x) e^{Rx} = +\infty. \quad (9)$$

Швидкість зростання функції  $M(r, \varphi)$  залежить від асимптотичного поведіння функції  $W_F(x) e^{Rx}$ , на що вказує нижченаведена теорема.

**Теорема 2.** Нехай  $\varphi$  — аналітична в  $\mathbb{D}_R$ ,  $0 < R < +\infty$ , характеристична функція ймовірнісного закону  $F$ , який задовольняє умову (9), а  $\rho^*[\varphi]$  — її порядок. Тоді

$$\overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\ln^+ \ln^+(W_F(x) e^{Rx})}{\ln x} = \frac{\rho^*[\varphi]}{\rho^*[\varphi] + 1} \quad i \quad \overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\ln x}{\ln \frac{x}{\ln^+(W_F(x) e^{Rx})}} = \rho^*[\varphi],$$

а якщо  $0 < \rho^*[\varphi] < +\infty$ , то для типу  $\sigma^*[\varphi]$  правильні формули

$$\sigma^*[\varphi] = \frac{\rho^\rho}{(\rho + 1)^{\rho+1}} \overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{(\ln^+(W_F(x) e^{Rx}))^{\rho+1}}{x^\rho} = \frac{\rho^\rho}{(\rho + 1)^\rho} \overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{x}{\left(\frac{x}{\ln^+(W_F(x) e^{Rx})}\right)^{\rho+1}},$$

де  $\rho = \rho^*[\varphi]$ .

Для  $R = 1$  формули з теореми 2 збігаються з формулами (5) і (6). Доцільність наведення формули для знаходження  $\rho^*[\varphi]$  і  $\sigma^*[\varphi]$  в теоремі 2 у двох варіантах видно з таких трьох теорем.

**Теорема 3.** Нехай функції  $\alpha \in L_{\text{пз}}$  і  $\beta \in L_{\text{пз}}$  такі, що  $(\beta^{-1}(c\alpha(x)))/x \rightarrow 0$  і  $\alpha(x)/(\beta^{-1}(c\alpha(x))) = (1 + o(1))\alpha(x)$  при  $x \rightarrow +\infty$  для кожного  $c \in (0, +\infty)$ , а  $\varphi$  — аналітична в  $\mathbb{D}_R$ ,  $0 < R < +\infty$ , характеристична функція ймовірнісного закону  $F$ , який задовольняє умову (9). Тоді

$$\overline{\lim}_{r \uparrow R} \frac{\alpha(\ln M(r, \varphi))}{\beta\left(\frac{1}{R-r}\right)} = \overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\alpha(x)}{\beta\left(\frac{x}{\ln^+(W_F(x) e^{Rx})}\right)}. \quad (10)$$

Зауважимо, що для  $R = 1$  формула (10) збігається з формулою (7), але умови на  $\alpha$  і  $\beta$  слабші, ніж у [9].

**Теорема 4.** Нехай функції  $\alpha \in L_{\text{пз}}$  і  $\beta \in L_{\text{пз}}$  такі, що  $\alpha(\ln x)/\beta(x) \rightarrow 0$ ,  $\alpha^{-1}(c\beta(x))/x \rightarrow 0$  і  $\beta(x/(\alpha^{-1}(c\beta(x)))) = (1 + o(1))\beta(x)$  при  $x \rightarrow +\infty$  для кожного  $c \in (0, +\infty)$ , а  $\varphi$  — аналітична в  $\mathbb{D}_R$ ,  $0 < R < +\infty$ , характеристична функція ймовірнісного закону  $F$ , який задовольняє умову (9). Тоді

$$\overline{\lim}_{r \uparrow R} \frac{\alpha(\ln M(r, \varphi))}{\beta\left(\frac{1}{R-r}\right)} = \overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\alpha(\ln^+(W_F(x)e^{Rx}))}{\beta(x)}.$$

Зауважимо, що умови на  $\alpha$  і  $\beta$  в теоремі 3 вказують на те, що функція  $\alpha$  зростає повільніше, ніж функція  $\beta$ , а з умов теореми 4 випливає, що функція  $\beta$  зростає повільніше, ніж функція  $\alpha$ . Цікавим є випадок коли функції  $\alpha$  і  $\beta$  мають однакове зростання, наприклад коли  $\alpha(x) \equiv \beta(x)$ . Правильна така теорема.

**Теорема 5.** Нехай функція  $\alpha \in L_{\text{пз}}$  така, що  $\alpha(\ln x)/\alpha(x) \rightarrow 0$  і  $\alpha(x/(\alpha^{-1}(c\alpha(x)))) = (1 + o(1))\alpha(x)$  при  $x \rightarrow +\infty$  для будь-якого  $c \in (0, 1)$ , а  $\varphi$  — аналітична в  $\mathbb{D}_R$ ,  $0 < R < \infty$ , характеристична функція ймовірнісного закону  $F$ , який задовольняє умову (9). Нехай  $\rho_\alpha^*[\varphi] = \overline{\lim}_{r \uparrow R} \alpha(\ln M(r, \varphi))/\alpha(1/(R-r))$ . Тоді якщо  $\rho_\alpha[\varphi] \geq 1$ , то  $\rho_\alpha^*[\varphi] = \overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \alpha(x)/\alpha\left(\frac{x}{\ln^+(W_F(x)e^{Rx})}\right)$ , а якщо  $\rho_\alpha^*[\varphi] < 1$ , то  $\rho_\alpha^*[\varphi] = \overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\alpha(\ln(W_F(x)e^{Rx}))}{\alpha(x)}$ .

У теоремах 3, 4 функції  $\alpha$  і  $\beta$  є повільно зростаючими. Проте можна отримати аналоги цих теорем, коли одна з цих функцій є степеневою. На це вказують нижченаведені теореми.

**Теорема 6.** Нехай  $\alpha \in L_{\text{пз}}$  і  $\alpha(x/\alpha(x)) = (1 + o(1))\alpha(x)$  при  $x \rightarrow +\infty$ , а  $\varphi$  — аналітична в  $\mathbb{D}_R$ ,  $0 < R < +\infty$ , характеристична функція ймовірнісного закону  $F$ , який задовольняє умову (9). Тоді

$$\overline{\lim}_{r \uparrow R} (R-r)\alpha(\ln M(r, \varphi)) = \overline{\lim}_{x \rightarrow \infty} \frac{\alpha(x)}{x} \ln^+(W_F(x)e^{Rx}).$$

**Теорема 7.** Нехай  $\beta \in L_{\text{пз}}$ ,  $(\ln x)/\beta(x) \rightarrow 0$  і  $\beta(x/\beta(x)) = (1 + o(1))\beta(x)$  при  $x \rightarrow +\infty$ , а  $\varphi$  — аналітична в  $\mathbb{D}_R$ ,  $0 < R < +\infty$ , характеристична функція ймовірнісного закону  $F$ , який задовольняє умову (9). Тоді

$$\overline{\lim}_{r \uparrow R} \frac{\ln M(r, \varphi)}{\beta\left(\frac{1}{R-r}\right)} = \overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\ln^+(W_F(x)e^{Rx})}{\beta(x)}.$$

Зауважимо, що в теоремах 4 і 7 усунути умову  $\alpha(\ln x)/\beta(x) \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow +\infty$  не можна. Покажемо це на прикладі теореми 7 з  $\beta(x) = \ln x$ . Нехай  $F(x) = 0$  для  $x \leq 0$ ,  $F(x) = 1 - e^{-R}$  для  $0 < x \leq 1$ , і  $F(x) = 1 - xe^{-Rx}$  для  $x \geq 1$ . Тоді  $\varphi(t) = 1 - e^{-R} + \int_1^\infty e^{itx} dF(x)$  і  $M(r, \varphi) = |\varphi(-ir)| = 1 - e^{-R} + e^{-(R-r)} + \frac{re^{-(R-r)}}{(R-r)^2}(1 + R - r) = \frac{(1 + o(1))R}{(R-r)^2}$ ,

при  $r \uparrow R$ , тобто  $\overline{\lim}_{r \uparrow R} \frac{\ln M(r, \varphi)}{\beta(1/(R-r))} = 2$ . З іншого боку,  $W_F(x) = xe^{-Rx}$  для  $x \geq 1$ , і, отже,

$$\overline{\lim}_{x \rightarrow +\infty} \frac{\ln(W_F(x)e^{Rx})}{\beta(x)} = 1.$$

1. Линник Ю. В., Островский Н. В. Разложение случайных величин и векторов. — Москва: Наука, 1972. — 479 с.



2. *Ramachandran B.* On the order and the type of entire characteristic functions // *Ann. Math.* – 1962. – **33**, No 4. – P. 1238–1255.
3. *Яковлева Н. И.* О росте целых характеристических функций вероятностных законов // *Теория функций, функц. анализ и их приложения.* – 1971. – Вып. 15. – С. 43–49.
4. *Яковлева Н. И.* О росте целых характеристических функций вероятностных законов // *Вопросы мат. физики и функц. анализа.* – Киев: Наук. думка, 1976. – С. 43–54.
5. *Шеремета М.* О связи между ростом максимума модуля целой функции и модулями коэффициентов ее степенного разложения // *Изв. вузов. Математика.* – 1967. – № 2. – С. 100–108.
6. *Винницкий Б. В.* Об одном свойстве целых характеристических функций вероятностных законов // *Там же.* – 1975. – № 4. – С. 95–97.
7. *Dewess M.* The tail behaviour of a distribution function and its connection to the growth of its entire characteristic function // *Math. Nachr.* – 1978. – **81**. – P. 217–231.
8. *Сорокивский В. М.* О росте характеристических функций вероятностных законов // *Изв. вузов. Математика.* – 1979. – № 9. – С. 48–52.
9. *Сорокивский В. М.* Об обобщенных порядках роста аналитических характеристических функций вероятностных законов // *Укр. мат. журн.* – 1987. – **33**, № 1. – С. 115–118.

*Львівський національний університет  
ім. Івана Франка*

*Надійшло до редакції 03.11.2011*

**О. М. Кинаш, М. И. Пароля, М. Н. Шеремета**

### **Возрастание характеристических функций вероятностных законов**

*Для аналитических в круге характеристических функций вероятностных законов в терминах обобщенных порядков установлена связь между возрастанием максимума модуля и убыванием суммы “хвостов” вероятностного закона.*

**O. M. Kinash, M. I. Parolya, M. M. Sheremeta**

### **A growth of the characteristic functions of probability laws**

*For the characteristic functions, which are analytic in a disk, of probability laws in terms of generalized orders, the relation between the modulus maximum growth and the decrease of a sum of “tails” of a probability law is established.*

Л. А. Курдаченко, Х. М. Муньоз-Есколано, Н. А. Турбай

## Спряжено-переставні підгрупи деяких нескінченних груп

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

Підгрупа  $H$  групи  $G$  називається *спряжено-переставною*, якщо  $HN^g = H^gN$  для кожного елемента  $g \in G$ . Доведено субнормальність спряжено-переставних підгруп у деяких класах нескінченних груп, таких, наприклад, як черніковські або майже поліциклічні групи. Доведено, що в інших класах нескінченних груп, таких, наприклад, як майже розв'язні мінімаксні групи, кожна спряжено-переставна підгрупа є зростаючою. Також розглянуто структуру нескінченних груп, кожна циклічна підгрупа яких є спряжено-переставною.

Підгрупа  $H$  групи  $G$  називається *переставною в групі  $G$* , якщо вона переставна з будь-якою підгрупою  $K$  групи  $G$ , тобто  $HK = KH$ . Переставні підгрупи є природним узагальненням нормальних підгруп. Вивчення властивостей таких підгруп почалося достатньо давно і виявилось досить плідним (див., наприклад, [1]). Зокрема, були описані групи (скінченні та нескінченні), в яких усі підгрупи переставні (див., наприклад, [1, 2.4]). У роботі [2] були розглянуті групи, що мають таку властивість:  $HN^g = H^gN$  для кожного елемента  $g \in G$ . Пізніше такі підгрупи були названі спряжено-переставними в  $G$  [3]. У роботі [2] доведено, що кожна спряжено-переставна підгрупа скінченної групи є субнормальною. У роботі [3] цей результат був повторений. Т. Фогель [4] розглянув деякі властивості груп, усі циклічні підгрупи яких спряжено-переставні. У роботі [5] описані скінченні групи, в яких кожна спряжено-переставна підгрупа є переставною. Деякі властивості спряжено-переставних підгруп отримані в [6]. Зокрема, доведено, що якщо група  $G$  задовольняє умови максимальності та мінімальності, то кожна її спряжено-переставна підгрупа є субнормальною. Зауважимо, що для багатьох типів груп  $G$  той факт, що вона одночасно задовольняє обидві умови максимальності та мінімальності, призводить до скінченності  $G$ . Наприклад, це має місце для локально ступінчатих груп. Нагадаємо, що група  $G$  називається *локально ступінчатою*, якщо кожна її скінченно породжена підгрупа містить власну підгрупу скінченного індексу. Для багатьох типів груп  $G$  той факт, що  $G$  задовольняє умову максимальності (відповідно мінімальності), означає, що  $G$  є майже поліциклічною (відповідно черніковською) групою. Тому природно виникає питання про спряжено-переставні підгрупи в черніковських та майже поліциклічних групах.

У даній роботі, зокрема, доведено, що спряжено-переставні підгрупи в черніковських та майже поліциклічних групах є субнормальними. Не можна стверджувати, що спряжено-переставні підгрупи будь-якої групи є субнормальними, оскільки існують приклади переставних підгруп, що не є субнормальними. Але кожна переставна підгрупа є зростаючою за відомою теоремою С. Стоунхевера ([7, теорема А]). Тому виникає природне питання: в яких класах нескінченних груп кожна спряжено-переставна підгрупа є зростаючою? Нами були знайдені деякі з таких класів.

Відзначимо спочатку такі властивості спряжено-переставних підгруп.

**Твердження 1.** Нехай  $G$  — група,  $H$  — її спряжено-переставна підгрупа. Якщо впорядкована за включенням множина

$$M = \{(g_1^{-1}Hg_1) \cdots (g_k^{-1}Hg_k) \mid g_1, \dots, g_k \in G, k \in \mathbb{N}\}$$

задовольняє умову максимальності, то  $H^G \neq G$ .

Виходячи від нормального замкнення підгрупи  $H$ , побудуємо спадний ряд послідовних нормальних замкнень  $H$  в  $G$

$$H^G = H_0 \geq H_1 \geq \cdots \geq H_\alpha \geq H_{\alpha+1} \geq \cdots \geq H_\gamma$$

за таким правилом:  $H_{\alpha+1} = H_\alpha^H$  для кожного  $\alpha < \gamma$ ,  $H_\lambda = \bigcap_{\mu < \lambda} H_\mu$  для граничного порядкового числа  $\lambda$ . Останній член  $H_\gamma$  цього ряду називається нижнім нормальним замкненням  $H$  в  $G$ . Підгрупа  $H$  називається спадною в  $G$ , якщо  $H$  збігається зі своїм нижнім нормальним замкненням.

**Теорема 1.** Нехай  $G$  — група,  $H$  — її спряжено-переставна підгрупа. Якщо впорядкована за включенням множина

$$M = \{(g_1^{-1}Hg_1) \cdots (g_k^{-1}Hg_k) \mid g_1, \dots, g_k \in G, k \in \mathbb{N}\}$$

задовольняє умову максимальності, то  $H$  є спадною підгрупою  $G$ .

**Наслідок 1.** Нехай  $G$  — група,  $H$  — її спряжено-переставна підгрупа. Якщо  $G$  задовольняє умову максимальності, то  $H$  є спадною підгрупою  $G$ .

**Наслідок 2** [6]. Нехай  $G$  — група,  $H$  — її спряжено-переставна підгрупа. Якщо  $G$  одночасно задовольняє умову максимальності і мінімальності, то  $H$  є субнормальною підгрупою  $G$ .

Нагадаємо, що підгрупа  $H$  групи  $G$  називається майже нормальною, якщо множина  $\{H^g \mid g \in G\}$  є скінченною. Це рівносильно тому, що індекс  $|G : N_G(H)|$  є скінченним.

**Наслідок 3.** Нехай  $G$  — група,  $H$  — її спряжено-переставна підгрупа. Якщо  $H$  є майже нормальною в  $G$ , то  $H$  — субнормальна підгрупа  $G$ .

**Наслідок 4** [6]. Нехай  $G$  — група,  $H$  — її спряжено-переставна підгрупа. Якщо  $H$  має скінченний індекс в  $G$ , то  $H$  є субнормальною підгрупою  $G$ .

Якщо  $G$  — група, то через  $\text{Tor}(G)$  позначатимемо максимальну нормальну періодичну підгрупу  $G$ . Зазначимо, що якщо  $G$  — локально нільпотентна група, то  $\text{Tor}(G)$  є її характеристичною підгрупою, більш того фактор-група  $G/\text{Tor}(G)$  не має скруту.

Нагадаємо, що абелева група  $G$  називається мінімаксною, якщо вона містить у собі таку вільну абелеву підгрупу  $H$  скінченного 0-рангу, що  $G/H$  є черніковською групою.

**Твердження 2.** Нехай  $G$  — група,  $A$  — її нормальна абелева підгрупа без скруту. Припустимо, що  $A$  — мінімаксна. Нехай  $H$  — підгрупа  $G$ , для якої  $G = AH$ . Якщо  $H$  є спряжено-переставною підгрупою  $G$ , то  $H$  є субнормальною в  $G$ .

Нехай  $G$  — майже розв'язна група. Будемо говорити, що  $G$  — мінімаксна, якщо  $G$  має скінченний ряд нормальних підгруп, нескінченні фактори якого є абелевими та мінімаксними.

Нехай  $G$  — майже розв'язна мінімаксна група. Оскільки її абелеві періодичні підгрупи є черніковськими, то  $\text{Tor}(G)$  є черніковською. Нехай  $\text{div}(G)$  — максимальна подільна підгрупа  $\text{Tor}(G)$  (подільна частина  $G$ ). Тоді  $G/\text{div}(G)$  містить у собі таку нормальну нільпотентну підгрупу  $L/\text{div}(G)$  без скруту, що  $G/L$  — майже абелева та скінченно породжена [8, теорема 4]. Якщо  $\text{div}(G) = \langle 1 \rangle$ , то  $G$  називається редукованою мінімаксною групою.

**Наслідок 5.** Нехай  $G$  — майже розв'язна мінімаксна група,  $H$  — її спряжено-переставна підгрупа. Якщо  $G$  — редукована, то  $H$  є субнормальною підгрупою  $G$ .

**Наслідок 6.** Нехай  $G$  — майже поліциклічна група,  $H$  — її спряжено-переставна підгрупа. Тоді  $H$  є субнормальною підгрупою  $G$ .

Вище відзначалося, що якщо спряжено-переставна підгрупа  $H$  має скінченну множину спряжених з нею підгруп, то вона є субнормальною. Зазначимо, що якщо множина спряжених  $H$  підгруп є скінченною, то  $N_G(H)$  містить у собі  $G$ -інваріантну підгрупу  $K$ , для якої фактор-група  $G/K$  є скінченною. Нижчеподаний наслідок узагальнює цю ситуацію.

**Наслідок 7.** Нехай  $G$  — група,  $H$  — її спряжено-переставна підгрупа. Припустимо, що  $N_G(H)$  містить у собі таку  $G$ -інваріантну підгрупу  $K$ , що фактор-група  $G/K$  є майже розв'язною та редукованою мінімаксною групою. Тоді  $H$  є субнормальною підгрупою  $G$ .

Розглянемо тепер спряжено-переставні підгрупи черніковських груп.

**Теорема 2.** Нехай  $G$  — черніковська група,  $H$  — її спряжено-переставна підгрупа. Тоді  $H$  є субнормальною підгрупою  $G$ . Більш того,  $[H, \text{div}(G)] = \langle 1 \rangle$ .

Наведений нижче результат значно посилює теорему 2.7 статті [6].

**Наслідок 8.** Нехай  $G$  — група, циклічні підгрупи якої є спряжено-переставними. Якщо  $G$  задовольняє умову мінімальності, то  $G$  є нільпотентною черніковською групою.

**Теорема 3.** Нехай  $G$  — група,  $H$  — її спряжено-переставна підгрупа. Припустимо, що  $G$  містить у собі нормальну підгрупу  $L$ , що задовольняє такі умови:

а)  $G = LH$ ;

б)  $L$  має зростаючий ряд  $H$ -інваріантних підгруп, фактори якого або скінченні, або є абелевими мінімаксними групами.

Тоді  $H$  є зростаючою підгрупою  $G$ .

**Наслідок 9.** Нехай  $G$  — група,  $H$  — її спряжено-переставна підгрупа. Припустимо, що  $G$  має зростаючий ряд нормальних підгруп, фактори якого або скінченні, або є абелевими мінімаксними групами. Тоді  $H$  є зростаючою підгрупою  $G$ .

**Наслідок 10.** Нехай  $G$  — майже розв'язна мінімаксна група,  $H$  — її спряжено-переставна підгрупа. Тоді  $H$  є зростаючою підгрупою  $G$ .

**Наслідок 11.** Нехай  $G$  — група,  $H$  — її спряжено-переставна підгрупа. Припустимо, що  $N_G(H)$  містить у собі таку  $G$ -інваріантну підгрупу  $K$ , що фактор-група  $G/K$  має зростаючий ряд нормальних підгруп, фактори якого або скінченні, або є абелевими мінімаксними групами. Тоді  $H$  є зростаючою підгрупою  $G$ .

Як уже зазначалося вище, в роботі [4] було розпочато розгляд груп, циклічні підгрупи яких є спряжено-переставними. Сформульований нижче результат дає суттєве посилення результатів роботи [4].

**Теорема 4.** Нехай  $G$  — група, всі циклічні підгрупи якої спряжено-переставні. Тоді  $G$  — локально нільпотентна та гіперабелева. Більш того, фактор-група  $G/\text{Tor}(G)$  є нільпотентною класу не вище 3.

Як наслідки з цієї теореми впливають теореми 4.1 та 4.6 роботи [4].

**Наслідок 12.** Нехай  $G$  — група, всі підгрупи якої спряжено-переставні. Тоді  $G$  — локально нільпотентна та гіперабелева. Більш того, фактор-група  $G/\text{Tor}(G)$  є нільпотентною класу не вище 3.

Як наслідок з цієї теореми впливає теорема 2.7 роботи [4].

1. Schmidt R. Subgroup lattices of groups. — Berlin: W. de Gruyter, 1994. — 572 p.
2. Szep J. Bemerkung zu einem Satz von O. Ore // Publ. Math. Debrecen. — 1953. — **3**. — P. 81–82.
3. Foguel T. Conjugate-permutable subgroups // J. Algebra. — 1997. — **191**. — P. 235–239.

4. Foguel T. Groups with all cyclic subgroups conjugate-permutable // J. Group Theory. – 1999. – **2**. – P. 47–52.
5. Ballester-Bolinches A., Beidleman J. C., Cossey J. et al. Permutable subnormal subgroups of finite groups // Arch. Math. – 2009. – **92**. – P. 549–557.
6. Li S., Meng Z. Groups with conjugate-permutable conditions // Math. Proc. Royal Irish Academy. – 2007. – **107 A**. – P. 115–121.
7. Stonehewer S. E. Permutable subgroups of infinite groups // Math. Z. – 1972. – **125**. – P. 1–16.
8. Мальцев А. И. О некоторых классах бесконечных разрешимых групп // Мат. сб. – 1951. – **28**, № 3. – С. 567–588.

Дніпропетровський національний  
університет ім. Олеся Гончара

Надійшло до редакції 21.11.2011

**Л. А. Курдаченко, Х. М. Муньоз-Эсколано, Н. А. Турбай**

### **Сопряженно-перестановочные подгруппы некоторых бесконечных групп**

*Подгруппа  $H$  группы  $G$  называется сопряженно-перестановочной, если  $HH^g = H^gH$  для каждого элемента  $g \in G$ . Доказана субнормальность сопряженно-перестановочных подгрупп в некоторых классах бесконечных групп, таких, например, как черниковские или почти полициклические группы. Доказано, что в других классах бесконечных групп, таких, например, как почти разрешимые минимаксные группы, каждая сопряженно-перестановочная подгруппа будет возрастающей. Также изучена структура бесконечных групп, каждая циклическая подгруппа которых является сопряженно-перестановочной.*

**L. A. Kurdachenko, J. M. Munoz-Escolano, N. A. Turbay**

### **Conjugate-permutable subgroups in some infinite groups**

*A subgroup  $H$  of a group  $G$  is called conjugate-permutable in  $G$  if  $HH^g = H^gH$  for each element  $g \in G$ . We proved that a conjugate-permutable subgroups are subnormal in some classes of infinite groups, in particular, in polycyclic-by-finite groups and in Chernikov groups. We find the classes of infinite groups, in which every conjugate-permutable subgroup is always ascendant, and we consider the structure of infinite groups, whose cyclic subgroups are conjugate-permutable.*

Б. М. Подлевський, В. В. Хлобистов

## Гradientний метод розв'язування нелінійних багатопараметричних спектральних задач

*(Представлено академіком НАН України В. Л. Макаровим)*

*Нелінійній багатопараметричній спектральній задачі у дійсному евклідовому просторі ставиться у відповідність варіаційна задача на мінімум деякого функціонала. Доведено еквівалентність спектральної та варіаційної задач. На базі gradientної процедури запропоновано чисельний алгоритм знаходження її власних значень та власних векторів. Доведено локальну збіжність та оцінки швидкості збіжності алгоритму.*

Узагальнена спектральна задача  $T(\lambda)x = 0$  з операторнозначною функцією  $T(\lambda): \mathbb{R}^m \rightarrow X(H)$  ( $X(H)$  — множина лінійних операторів, що діють у деякому гільбертовому просторі  $H$ ), яка лінійно або нелінійно залежить від декількох спектральних параметрів  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ , виникає у багатьох областях аналізу та математичної фізики.

Різні постановки таких задач, відповідна спектральна теорія, застосування та деякі чисельні методи їх розв'язування є предметом дослідження, наприклад, у роботах [1–10].

У даній роботі розглядається нелінійна за спектральними параметрами багатопараметрична задача на власні значення вигляду

$$T(\lambda)x = 0, \quad x \in E^n, \quad x \neq 0 \quad (1)$$

в дійсному евклідовому просторі  $E^n$ , усі скалярні параметри якої  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) \in E^m$  спектральні.

Такі задачі є ще малодослідженими як з теоретичної точки зору (на відміну від лінійних слабкозв'язних багатопараметричних спектральних задач, для яких розроблена спектральна теорія [2, 8, 10], та низка чисельних методів [1, 3, 9]), так і з точки зору побудови чисельних методів їх розв'язування.

У даній роботі пропонується варіаційний підхід, який відрізняється від підходу, запропонованого в роботах [3, 5, 6], до розв'язування таких задач, при якому багатопараметрична спектральна задача заміняється еквівалентною варіаційною задачею на мінімум деякого функціонала. В основі чисельного алгоритму мінімізації функціонала пропонується використати gradientну процедуру та метод Ньютона до розширеної задачі у просторі прямої суми евклідових просторів  $E^n$  та  $E^m$ . В результаті отримуємо алгоритм знаходження досить простого для обчислення кроку gradientної ітерації та одночасного визначення власного вектора і набору власних значень.

**Власні вектори та власні значення як точки мінімуму.** Нехай  $E^n$  — дійсний евклідовий простір зі скалярним добутком  $(\cdot, \cdot)_{E^n}$  та нормою  $\|\cdot\|_{E^n}$ , а  $T(\lambda)$  — квадратна матриця розмірності  $n \times n$ , елементи якої нелінійно залежать від параметрів  $\lambda_i \in E^1$ ,  $i = 1, \dots, m$ . Нелінійна багатопараметрична задача на власні значення полягає у знаходженні такого набору спектральних параметрів  $\lambda^* = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*)$ , що існує нетривіальний розв'язок  $x^* \neq 0$  рівняння (1). Такий набір спектральних параметрів  $\lambda^* = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*)$  назовемо узагальненим власним значенням або власним набором, а відповідний розв'язок  $x^*$  — узагальненим власним вектором задачі (1).

Поряд з задачею (1) розглянемо задачу про знаходження такого набору параметрів  $\lambda = \{\lambda_1, \dots, \lambda_m\} \in E^m$  і таких векторів  $x$ , на яких функціонал

$$F(u) = \frac{1}{2} \|T(\lambda)x\|_{E^n}^2, \quad \forall u = \{x, \lambda\} \in H = E^n \oplus E^m, \quad x \neq 0, \quad (2)$$

набуває мінімального значення, тобто

$$F(u) \rightarrow \min_u, \quad u \in U \subset H \quad (x \neq 0), \quad (3)$$

де  $U$  — деяка опукла множина, яка містить точки  $u^* = \{x^*, \lambda^*\}$ , що задовольняють рівняння (1);  $H$  — евклідов простір, у якому скалярний добуток та норма визначаються таким чином:

$$(u, v)_H = (u_1, u_2)_{E^n} + (v_1, v_2)_{E^m}, \quad \|u\|_H = \sqrt{\|u_1\|_{E^n}^2 + \|v_1\|_{E^m}^2},$$

$$u = \{u_1, v_1\}, \quad v = \{u_2, v_2\}, \quad u_1, u_2 \in E^n, \quad v_1, v_2 \in E^m.$$

Множину точок мінімуму  $F(u)$  на  $U$  будемо позначати через

$$U_* = \{u: u \in U, F(u) = 0\}$$

і надалі вважатимемо, що оператор-функція  $T(\lambda)$  є двічі диференційовною за Фреше, тобто для будь-якого  $\lambda_k \in E^1$ ,  $k = 1, 2, \dots, m$ , існують частинні похідні  $\partial T(\lambda)/\partial \lambda_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, m$ , та  $\partial^2 T(\lambda)/(\partial \lambda_k \partial \lambda_l)$ ,  $k, l = 1, 2, \dots, m$ , та покажемо, що задачі (1) та (3) еквівалентні.

Якщо розглянути приріст функціонала  $F(u + \Delta u) - F(u) = F(x + h, \lambda + q) - F(x, \lambda)$  для будь-яких  $u$ ,  $u + \Delta u \in U$ , де  $\Delta u = \{h, q\} \in U$ , то після нескладних викладок отримуємо, що

$$\begin{aligned} F(u + \Delta u) - F(u) &= F(x + h, \lambda + q) - F(x, \lambda) = \\ &= (T(\lambda)x, T(\lambda)h)_{E^n} + \left( T(\lambda)x, \sum_{i=1}^m \frac{\partial T(\lambda)}{\partial \lambda_i} x q_i \right)_{E^n} + \frac{1}{2} \left\{ (T(\lambda)h, T(\lambda)h)_{E^n} + \right. \\ &+ 2 \left( T(\lambda)h, \sum_{i=1}^m \frac{\partial T(\lambda)}{\partial \lambda_i} x q_i \right)_{E^n} + \left. \left( \sum_{i=1}^m \frac{\partial T(\lambda)}{\partial \lambda_i} x q_i, \sum_{i=1}^m \frac{\partial T(\lambda)}{\partial \lambda_i} x q_i \right)_{E^n} + \right. \\ &+ \left. 2 \left( T(\lambda)x, \sum_{i=1}^m \frac{\partial T(\lambda)}{\partial \lambda_i} h q_i \right)_{E^n} + (T(\lambda)x, d^2 T(\lambda, q)x)_{E^n} \right\} + o(\|\Delta u\|_H^2). \end{aligned} \quad (4)$$

Отже, перший диференціал функціонала (2) набуде вигляду

$$\begin{aligned} d\{F(x, \lambda); (h, q)\} &= (T(\lambda)x, T(\lambda)h)_{E^n} + \sum_{i=1}^m (T(\lambda)x, B_i(\lambda)x)_{E^n} q_i = \\ &= (T * (\lambda)T(\lambda)x, h)_{E^n} + (f(\lambda, x), q)_{E^m} = (u_g, \Delta u)_H, \end{aligned} \quad (5)$$

де

$$f(\lambda, x) = (f_1(\lambda, x), f_2(\lambda, x), \dots, f_m(\lambda, x)),$$

$$f_i(\lambda, x) = (T(\lambda)x, B_i(\lambda)x)_{E^n}, \quad B_i = \frac{\partial T(\lambda)}{\partial \lambda_i}, \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

Звідси для градієнта функціонала (2) отримуємо зображення

$$\begin{aligned} \text{grad } F(u) &= \nabla F(u) = u_g = \\ &= \{(T^*(\lambda)T(\lambda)x, e_1), \dots, (T^*(\lambda)T(\lambda)x, e_n), f_1(\lambda, x), f_2(\lambda, x), \dots, f_m(\lambda, x)\}, \end{aligned}$$

де  $e_i \in E^n$  — вектор,  $i$ -та координата якого дорівнює 1, а решта — нулі.

Нехай  $T(\lambda)x = 0$ ,  $x \neq 0$ . Тоді з (5) випливає, що  $\nabla F(u) = 0$ . Нехай тепер  $\nabla F(u) = 0$ . Тоді також з (5) маємо

$$T^*(\lambda)T(\lambda)x = 0 \Rightarrow (T^*(\lambda)T(\lambda)x, x)_{E^n} = 0 \Rightarrow (T(\lambda)x, T(\lambda)x)_{E^n} = 0 \Rightarrow T(\lambda)x = 0,$$

отже справджується таке твердження.

**Теорема 1.** *Кожний власний вектор  $x^*$ , що відповідає власному набору  $\lambda^* = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*)$  задачі (1) є стаціонарною точкою  $u^* = \{x^*, \lambda^*\}$  функціонала (2) і, навпаки, кожна стаціонарна точка функціонала (2)  $u^* = \{x^*, \lambda^*\}$  відповідає власному вектору  $x^*$  та власному набору  $\lambda^* = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*)$  задачі (1).*

*Зауваження.* Оскільки  $F(u) \geq 0$ ,  $F(u^*) = 0$ ,  $u, u^* \in U$ , то кожна стаціонарна точка  $u^*$  функціонала  $F(u)$  є точкою його локального (а також глобального) мінімуму.

Оскільки на множині стаціонарних точок  $T(\lambda)x = 0$ , то з формули (4) випливає, що

$$d^2\{F(x, \lambda); (h, q)\} = \left\| T(\lambda)h + \sum_{i=1}^m B_i x q_i \right\|_{E^n}^2 \geq 0,$$

тобто справджується таке твердження.

**Лема 1.** *Нехай  $T(\lambda)$  є двічі диференційовною за Фреше. Тоді функціонал (2) є опуклим на множині стаціонарних точок.*

Таким чином, розв'язування задачі (1) еквівалентне знаходженню стаціонарних точок опуклого функціонала (2), які є його точками мінімуму.

**Чисельний алгоритм.** Цей результат дозволяє побудувати градієнтну процедуру для чисельного розв'язування задачі (3), а отже, і задачі (1) у вигляді

$$u_{k+1} = u_k - \gamma_k \nabla F(u_k), \quad \gamma_k = \gamma(u_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Величину  $\gamma_k$  на кожному кроці будемо обчислювати за допомогою одного кроку модифікованого методу Ньютона як для скалярного рівняння

$$F(u_k - \gamma_k \nabla F(u_k)) = 0,$$

тобто

$$\gamma_k = \frac{F(u_k)}{(\nabla F(u_0), \nabla F(u_0))_H} = \frac{F(u_k)}{\|\nabla F(u_0)\|_H^2}. \quad (6)$$

Надалі, для спрощення запису, індекс  $H$  у позначенні скалярного добутку та норми будемо опускати.



Отже, ітераційний процес запишеться у вигляді

$$u_{k+1} = u_k - \frac{F(u_k)}{\|\nabla F(u_0)\|^2} \nabla F(u_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

При виборі початкового наближення, в певному сенсі близького до власного вектора та набору власних значень, ітераційний процес (7) збігається до стаціо-нарної точки функціонала (2)  $u^* = \{x^*, \lambda^*\}$ , у якій досягається його мінімум, тобто до власного вектора  $x^*$  та набору власних значень  $\lambda^* = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*)$  задачі (1).

Для цього ітераційного процесу в роботі наведено такі теореми збіжності та оцінки їх швидкості.

**Теорема 2.** *Нехай виконуються умови лема 1 і градієнт функціонала (2) задовольняє умову Ліпшица*

$$\|\nabla F(u) - \nabla F(z)\| \leq L\|u - z\|, \quad \forall u, z \in U, \quad L > 0.$$

Якщо для деякого початкового наближення  $u_0 = (x_0, \lambda^{(0)}) \in U$  виконується умова

$$0 < \gamma_0 \equiv \gamma(u_0) \leq \frac{1}{L},$$

то ітераційний процес (7) збігається до точки мінімуму функціонала (2)  $u^* = \{x^*, \lambda^*\}$ , а отже, до власного вектора  $x^*$  та набору власних значень  $\lambda^* = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*)$  задачі (1), тобто

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \rho(u_k, U_*) = \lim_{k \rightarrow \infty} \rho(u_k, u^*) = 0, \quad \lim_{k \rightarrow \infty} F(u_k) = F(u^*) = 0, \quad (8)$$

і справджується оцінка

$$F(u_k) \leq 2dF(u_0)[2d + \gamma_0 k]^{-1}, \quad (9)$$

де константа  $d > 0$  така, що  $\|u_k - u^*\| \leq d$ ,  $k = 0, 1, \dots$

Відзначимо, що якщо функціонал буде сильно опуклим, то існує така константа  $\delta > 0$ , що

$$F(u) - F(v) \geq (\nabla F(v), u - v) + \delta\|u - v\|^2, \quad u, v \in U. \quad (10)$$

**Теорема 3.** *Нехай виконуються умови теореми 2, а матриця  $T(\lambda)$  задачі (1) така, що функціонал (2) є сильно опуклим на множині  $U$ . Тоді ітераційний процес (7) збігається до точки мінімуму функціонала (2)  $u^* = \{x^*, \lambda^*\}$ , а, отже, до власного вектора  $x^*$  та набору власних значень  $\lambda^* = (\lambda_1^*, \dots, \lambda_m^*)$  задачі (1), тобто справджуються співвідношення (8), а також оцінки*

$$F(u_k) \leq F(u_0)[1 + 2\delta\gamma_0 k]^{-1}, \quad (11)$$

$$\|u_k - u^*\|^2 \leq F(u_0)[(1 + 2\delta\gamma_0 k)\delta]^{-1}, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (12)$$

де  $\delta$  — константа з нерівності (10).

**Висновки та зауваження.** Основне завдання при виборі величини  $\gamma_k$  у процесах мінімізації — це забезпечити виконання нерівності  $F(u_{k+1}) < F(u_k)$ . Як правило,  $\gamma_k$ , де це можливо, обчислюють одним з методів одновимірної мінімізації функції  $F(u_k - \gamma_k \nabla F(u_k))$ .

У роботі [11] пропонується вибирати  $\gamma_k$  як найбільше з чисел, що задовольняють нерівність

$$F(u_k) - F(u_k - \gamma_k \nabla F(u_k)) \geq q_k \gamma_k \|\nabla F(u_k)\|^2 \quad (13)$$

при деяких  $0 < q_k < 1$ . У даній роботі задачу одновимірної мінімізації у класичній постановці для визначення кроку  $\gamma_k$  замінено обчисленням  $\gamma_k$  за методом Ньютона для відповідного скалярного рівняння. Це не вимагає великих затрат, оскільки потрібно обчислювати лише значення функціонала у даній точці на кожному кроці, причому вибір  $\gamma_k$  у вигляді (6) задовольняє нерівність (13) для кожного  $k$  при  $q_k = q = 1/2$ . Незважаючи на те, що оцінки точності в [11] для сильно опуклого функціонала є дещо сильнішими від (11), (12), вибір  $\gamma_k$  у вигляді (6) є кращим з огляду на простоту та обчислювальні затрати.

*Робота виконана при частковій підтримці ДФФД України № 41.1/022.*

1. Абрамов А. А., Ульянова В. И., Юхно Л. Ф. Метод решения многопараметрической спектральной задачи для некоторых систем дифференциальных уравнений // Журн. вычислит. матем. и мат. физики. – 2000. – 40, № 1. – С. 21–29.
2. Atkinson F. V. Multiparameter eigenvalue problems. matrices and compact operators. Vol. 1. – New York, London: Academic Press, 1972. – 220 p.
3. Browne P. J., Sleeman B. D. A numerical technique for multiparameter eigenvalue problems // IMA J. Numer. Anal. – 1982. – 2(4). – P. 451–457.
4. Khlobystov V. V., Podlevskiy B. M. Variational approach to solving a class of nonlinear multiparameter spectral problems // Журн. обчисл. та прикл. матем. – 2011. – No 2(105). – С. 44–50.
5. Khlobystov V. V., Podlevskiy B. M. Variation-gradient method of the solution of one class of nonlinear multiparameter eigenvalue problems // Там само. – 2009. – No 1(97). – С. 70–78.
6. Подлевський Б. М. Варіаційний підхід до розв'язування лінійних багатопараметричних задач на власні значення // Укр. мат. журн. – 2009. – 61, № 9. – С. 1247–1256.
7. Подлевский Б. М. О некоторых нелинейных двухпараметрических спектральных задачах математической физики // Математ. моделирование. – 2010. – 22, № 5. – С. 131–145.
8. Sleeman B. D. Multiparameter spectral theory in Hilbert space. – London, San Francisco, Melbourne: Pitman Press, 1978. – 128 p.
9. Slivnik T., Tomšiu G. A numerical method for the solution of two-parameter eigenvalue problem // J. Comp. Appl. Math. – 1986. – 15, No 1. – P. 109–115.
10. Volkmer H. Multiparameter eigenvalue problems and expansion theorems. – Berlin: Springer, 1988. – 157 p.
11. Карманов В. Г. Математическое программирование: Уч. пос. – 5-е изд. – Москва: Физматлит, 2004. – 264 с.

*Институт прикладних проблем механіки  
і математики ім. Я. С. Підстригача  
НАН України, Львів*

*Надійшло до редакції 26.12.2011*

**Б. М. Подлевский, В. В. Хлобыстов**

### **Градиентный метод решения нелинейных многопараметрических спектральных задач**

*Нелинейной многопараметрической спектральной задаче в действительном евклидовом пространстве ставится в соответствие вариационная задача на минимум некоторого функционала. Доказана эквивалентность спектральной и вариационной задач. На базе градиентной процедуры предлагается численный алгоритм нахождения ее собственных значений и собственных векторов. Доказана локальная сходимость и оценки скорости сходимости алгоритма.*

B. M. Podlevskiy, V. V. Khlobystov

## A gradient method for solving the nonlinear multiparameter spectral problems

*In a real abstract Hilbert space, the nonlinear multiparameter spectral problem is put in accordance to a variation problem on minimum of some functional. The equivalence of the spectral and variation problems is proved. On the base of a gradient procedure, the numerical algorithm of finding its eigenvalues and the eigenvectors is proposed. The local convergence of the algorithm and the estimation of the rate of its convergence are proved.*



УДК 519.6:517.9

© 2012

Академик НАН України В. С. Дейнека

### Оптимальное управление нестационарным тепловым процессом и идентификация параметров среды при известных тепловых потоках

*В работе исследован вопрос оптимального управления состоянием параболической системы с квадратичным функционалом качества при наблюдении за следом решения и его производной. Получены явные выражения градиентов функционала-невязки для идентификации мощности теплового потока и коэффициента теплопроводности.*

Ранее в работах [1–3] рассмотрены вопросы оптимального управления состояниями параболических систем при наблюдениях за следами решения задач состояния. В [4, 5] на основе результатов теории оптимального управления получены явные выражения градиентов функционалов-невязок для идентификации различных параметров упомянутой системы.

В данной работе исследован вопрос оптимального управления нестационарным диффузионным процессом при заданных значениях температуры и мощности теплового потока с квадратичным функционалом качества. На основе полученных результатов построены явные выражения градиентов функционалов-невязок для идентификации мощности теплового потока и коэффициента теплопроводности при упомянутых наблюдениях.

**Оптимальное управление.** Пусть на области  $\Omega_T = \Omega \times (0, T)$ ,  $\Omega = (0, l)$  определено уравнение диффузии

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k(x) \frac{\partial y}{\partial x} \right) + f(x, t), \quad (1)$$

где

$$0 < k_0 \leq k(x) \leq k_1 < \infty, \quad k \in C(\bar{\Omega}) \cap C^1(\Omega), \quad f \in C(\Omega_T).$$

На концах отрезка  $[0, l]$  при  $t \in (0, T)$  заданы смешанные краевые условия

$$-k \frac{\partial y}{\partial x} = -\alpha y + \beta, \quad x = 0, \quad (2)$$

$$k \frac{\partial y}{\partial x} = u, \quad x = l. \quad (3)$$

При  $t = 0$  задано начальное условие

$$y(x, 0) = y_0(x), \quad x \in \Omega. \quad (4)$$

На основании задачи состояния (1)–(4) сформулируем задачу оптимального управления. Каждому управлению  $u \in \mathcal{U}$  поставим в соответствие значение функционала стоимости:

$$J(u) = \|Cy(u) - z_g\|_{\mathcal{H}}^2 + (\mathcal{N}u, u)_{\mathcal{U}}, \quad (5)$$

где

$$Cy(u) = (y_1(t), y_2(x; t)) \in \mathcal{H} = L_2(0, T) \times L_2(0, T; L_2(\Omega_0)),$$

$$(\varphi, \psi)_{\mathcal{H}} = \int_0^T \varphi_1 \psi_1 dt + \int_0^T \int_{\Omega_0} \varphi_2 \psi_2 dx dt, \quad \Omega_0 \subset \Omega, \quad \|\varphi\|_{\mathcal{H}} = (\varphi, \varphi)_{\mathcal{H}}^{1/2},$$

$$\varphi = (\varphi_1(t), \varphi_2(x, t)), \quad \psi = (\psi_1(t), \psi_2(x, t)); \quad \varphi, \psi \in L_2(0, T) \times L_2(0, T; L_2(\Omega_0)),$$

$$y_1(t) = y(u; 0, t), \quad y_2(x, t)|_{\Omega_0} = k \frac{\partial y(u)}{\partial x} \Big|_{\Omega_0},$$

$$\mathcal{N}u = \bar{a}u, \quad \bar{a} = \text{const} > 0, \quad u \in \mathcal{U} = L_2(0, T).$$

Пусть  $V$  — некоторое гильбертово пространство, а  $V'$  — пространство, двойственное к нему. Введем, аналогично [6], пространство  $L^2(0, T; V)$  функций  $t \rightarrow f(t)$ , отображающих интервал  $(0, T)$  в пространство  $V$  измеримых и таких функций, что

$$\left( \int_0^T \|f(t)\|_V^2 dt \right)^{1/2} < \infty.$$

Введем пространство  $W(0, T) = \{f \in L^2(0, T; V) : df/dt \in L^2(0, T; V')\}$ . На основании [2, 6] каждому управлению  $u \in \mathcal{U}$  соответствует единственное состояние — функция  $y = y(u) = y(u; x, t) \in W(0, T)$ , которая  $\forall v(x) \in V_0 = W_2^1(\Omega)$  удовлетворяет равенствам

$$\int_{\Omega} \frac{dy}{dt} v dx + a(y, v) = l(u; v), \quad t \in (0, T), \quad (6)$$

$$y(x, 0) = y_0(x), \quad x \in \Omega, \quad (7)$$

где

$$a(y, v) = \int_{\Omega} k \frac{\partial y}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dx + \alpha y(0, t) v(0), \quad l(u; v) = \int_{\Omega} f v dx + \beta v(0) + uv(l). \quad (8)$$

Обозначим

$$\pi(u, v) = (\bar{y}(u) - \bar{y}(0), \bar{y}(v) - \bar{y}(0))_{\mathcal{H}} + (\bar{a}u, v)_{\mathcal{U}}, \quad (9)$$

$$L(v) = (z_g - \bar{y}(0), \bar{y}(v) - \bar{y}(0))_{\mathcal{H}},$$

где

$$Cy(u) = \bar{y}(v) = (y_1(v; t), y_2(v; x, t)),$$

$$y_1(v; t) = y(v; 0, t), \quad y_2(v; x, t) = k \frac{\partial y(v)}{\partial x}, \quad x \in (\Omega_0).$$

Тогда

$$J(u) = \pi(u, u) - 2L(u) + \|z_g - \bar{y}(0)\|_{\mathcal{H}}^2. \quad (10)$$

Пусть  $\tilde{y}' = \tilde{y}(u')$ ,  $\tilde{y}'' = \tilde{y}(u'')$  — решения из  $W(0, T)$  задачи (6), (7) при  $f \equiv 0$ ,  $\beta \equiv 0$  и функции  $u = u(t)$ , равной, соответственно,  $u'$ ,  $u'' \in \mathcal{U}$ . Тогда

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\tilde{y}' - \tilde{y}''\|^2 + \alpha_0 \|\tilde{y}' - \tilde{y}''\|_V^2 \leq \alpha_1 |u' - u''| \|\tilde{y}' - \tilde{y}''\|_V.$$

Следовательно,

$$\|\tilde{y}' - \tilde{y}''\|_{V \times L_2} \leq \frac{\alpha_1}{\alpha_0} \|u' - u''\|_{\mathcal{U}}. \quad (11)$$

С учетом теорем вложения [7] имеем

$$\|\bar{y}' - \bar{y}''\|_{\mathcal{H}} \leq c_1 \|u' - u''\|_{\mathcal{U}}. \quad (12)$$

Полученное неравенство обеспечивает непрерывность билинейной формы  $\pi(\cdot, \cdot)$  и линейного функционала  $L(\cdot)$  на  $\mathcal{U}$ . На основании [6, гл. 1, теорема 1.1] доказано утверждение.

**Теорема 1.** Пусть при каждом  $u \in \mathcal{U}$  состояние системы определяется как решение задачи (6), (7). Тогда существует единственный элемент  $u$  выпуклого замкнутого в  $\mathcal{U}$  множества  $\mathcal{U}_\partial$ , для которого

$$J(u) = \inf_{v \in \mathcal{U}_\partial} J(v). \quad (13)$$

Управление  $u \in \mathcal{U}_\partial$  оптимально тогда и только тогда, когда

$$\langle J'(u), v - u \rangle \geq 0 \quad \forall v \in \mathcal{U}_\partial, \quad (14)$$

т. е. когда

$$(\bar{y}(u) - z_g, \bar{y}(v) - \bar{y}(u))_{\mathcal{H}} + (\bar{a}u, v - u)_{\mathcal{U}} \geq 0 \quad \forall v \in \mathcal{U}_\partial. \quad (15)$$

Единственное сопряженное состояние  $\forall v \in \mathcal{U}$  определяется как функция  $p \in W(0, T)$ , которая  $\forall z(x) \in V_0$  удовлетворяет равенствам

$$-\left(\frac{\partial \psi}{\partial t}, z\right) + a(\psi, z) = (y(v; 0, t) - z_{g_1}(t))z(0) + \int_{\Omega_0} \left(k \frac{\partial y(v)}{\partial x} - z_{g_2}\right) k \frac{\partial z}{\partial x} dx, \quad (16)$$

$$t \in (0, T),$$

$$\psi|_{t=T} = 0, \quad x \in \Omega. \quad (17)$$

Выбирая  $z = y(v) - y(u)$ , с учетом (6), (7), (15) на основании (16), (17) имеем

$$(y(u) - z_g, y(v) - y(u))_{\mathcal{H}} = \int_0^T (v - u)\psi(l, t) dt. \quad (18)$$

Учитывая полученное равенство (18), необходимое условие (15) оптимальности управления  $u \in \mathcal{U}_{\partial}$  приобретает вид

$$\int_0^T (\psi(l, t) + \bar{a}u)(v - u) dt \geq 0 \quad \forall v \in \mathcal{U}_{\partial}. \quad (19)$$

Следовательно, выполнение равенств (6), (7), (16), (17) и неравенства (19) является необходимым и достаточным условием существования оптимального управления  $u \in \mathcal{U}_{\partial}$ . Если  $\mathcal{U}_{\partial} = \mathcal{U}$ , из (19) получаем

$$u = -\frac{\psi(l, t)}{\bar{a}}.$$

**Идентификация мощности теплового потока.** Пусть состояние системы описывается начально-краевой задачей (1)–(4), где  $u = u(t) \in \mathcal{U} = L_2(0, T)$  является неизвестным. Предположим, что при  $x = 0$  известно решение этой задачи, а на  $\Omega_0 \subset \Omega$  — известна мощность теплового потока, заданные равенствами

$$y(0, t) = f_0(t), \quad k \frac{\partial y}{\partial x} \Big|_{\Omega_0} = f_1(x, t)|_{\Omega_0}, \quad t \in (0, T). \quad (20)$$

Функционал-невязка имеет вид

$$J(u) = \frac{1}{2} \int_0^T (y(u; 0, t) - f_0(t))^2 dt + \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega_0} \left( k \frac{\partial y(u)}{\partial x} - f_1 \right)^2 dx dt. \quad (21)$$

Задачу (6), (7), (21) будем решать с помощью градиентного метода

$$u_{n+1} = u_n - \beta_n p_n, \quad n = 0, 1, \dots, n^*, \quad (22)$$

где направление спуска  $p_n$  и коэффициент  $\beta_n$  определяются выражениями [8]:

для метода минимальных ошибок

$$p_n = J'_{u_n}, \quad \beta_n = \frac{\|e_n\|^2}{\|J'_{u_n}\|^2},$$

для метода скорейшего спуска

$$p_n = J'_{u_n}, \quad \beta_n = \frac{\|J'_{u_n}\|^2}{\|AJ'_{u_n}\|^2},$$

для метода сопряженных градиентов

$$p_n = J'_{u_n} + \gamma_n p_{n-1}, \quad \gamma_0 = 0, \quad \gamma_n = \frac{\|J'_{u_n}\|^2}{\|J'_{u_{n-1}}\|^2}, \quad \beta_n = \frac{(J'_{u_n}, p_n)}{\|Ap_n\|^2},$$

где  $J'_{u_n}$  — градиент функционала  $J(u)$  в точке

$$u = u_n, \quad e_n = Au_n - \bar{f}, \quad Au_n = \left\{ y(u_n)|_{x=0}, k \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} \Big|_{\Omega_0} \right\}, \quad \bar{f} = (f_0, f_1),$$

$$\|e_n\|^2 = \int_0^T (y(u_n; 0, t) - f_0)^2 dt + \int_0^T \int_{\Omega_0} \left( k \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} - f_1 \right)^2 dx dt.$$

Учитывая обозначения (9), при  $\bar{a} = 0$  имеем

$$2J(v) = \pi(v, v) - 2L(v) + \|\bar{f} - \bar{y}(0)\|_{\mathcal{H}}^2.$$

Поскольку

$$\begin{aligned} \langle J'_{u_n}, \Delta u_n \rangle &= J(u_n + \lambda \Delta u_n) - J(u_n) = \pi(u_n, u_{n+1} - u_n) - L(u_{n+1} - u_n) = \\ &= (\bar{y}(u_n) - \bar{f}, \bar{y}(u_{n+1}) - \bar{y}(u_n))_{\mathcal{H}} = \\ &= - \int_0^T \left( \frac{\partial \psi}{\partial t}, y(u_{n+1}) - y(u_n) \right) dt + \int_0^T a(\psi, y(u_{n+1}) - y(u_n)) dt = \int_0^T \psi(l, t) \Delta u_n dt, \end{aligned}$$

то  $J'_{u_n} = \tilde{\psi}_n$ , где  $\tilde{\psi}_n = \psi(l, t)$ ,  $\|J'_{u_n}\|^2 = \int_0^T \tilde{\psi}_n^2 dt$ .

*Замечание 1.* Если  $\mathcal{U} = R$ , то  $J'_{u_n} = \tilde{\psi}_n$ ,  $\tilde{\psi}_n = \int_0^T \psi(l, t) dt$ ,  $\|J'_{u_n}\| = |\tilde{\psi}_n|$ .

*Замечание 2.* Если  $u = \sum_{i=1}^m \alpha_i \varphi_i(t)$ , где  $\{\varphi_i(t)\}_{i=1}^m$  — система линейно независимых функций, то  $J'_{u_n} = \tilde{\psi}_n$ ,  $\tilde{\psi}_n = \{\tilde{\psi}_n^i\}_{i=1}^m$ ,  $\tilde{\psi}_n^i = \int_0^T \varphi_i(t) \psi(l, t) dt$ ,  $\|J'_{u_n}\|^2 = \sum_{i=1}^m (\tilde{\psi}_n^i)^2$ .

**Идентификация коэффициента теплопроводности.** Пусть состояние системы определяется начально-краевой задачей (1)–(4), где  $u = \beta_1(t)$  — известно, а коэффициент  $k = u \in \mathcal{U} = R_+ = (0, \infty)$  — неизвестен. Предположим, что заданы наблюдения

$$y(0, t) = f_0(t), \quad u \frac{\partial y}{\partial x} \Big|_{\Omega_0} = f_1(x, t)|_{\Omega_0}, \quad t \in (0, T). \quad (23)$$

Функционал-невязка имеет вид

$$J(u) = \frac{1}{2} \left( \int_0^T (y(u; 0, t) - f_0(t))^2 dt + \int_0^T \int_{\Omega_0} \left( u \frac{\partial y(u)}{\partial x} - f_1(x, t) \right)^2 dx dt \right). \quad (24)$$

При каждом фиксированном  $u \in \mathcal{U}$  обобщенным решением задачи (1)–(4) является функция  $y(u; x, t) \in W(0, T)$ , которая  $\forall v(x) \in V_0$  удовлетворяет равенствам

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{dy}{dt} v dx + a(u; y, v) &= l(v), \quad t \in (0, T), \\ y(x, 0) &= y_0(x), \quad x \in \Omega, \end{aligned} \quad (25)$$



где

$$a(u; y, v) = \int_{\Omega} u \frac{\partial y}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dx + \alpha y(u; 0, t)v(0), \quad l(v) = \int_{\Omega} f v dx + \beta v(0) + \beta_1 v(l).$$

Пусть

$$\pi(u, v) = (\bar{y}(u) - \bar{y}(u_n), \bar{y}(v) - \bar{y}(u_n))_{\mathcal{H}}, \quad L(v) = (\bar{f} - \bar{y}(u_n), \bar{y}(v) - \bar{y}(u_n))_{\mathcal{H}},$$

где

$$\bar{y}(u_n) = \left( y(u_n; 0, t), u_n \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} \Big|_{\Omega_0} \right), \quad \bar{f} = (f_0(t), f_1(x, t)|_{\Omega_0}).$$

Тогда

$$2J(v) = \pi(v, v) - 2L(v) + \|\bar{f} - \bar{y}(u_n)\|_{\mathcal{H}}^2.$$

Пренебрегая членами второго порядка малости, на основании задачи (1)–(4) определим функцию  $\tilde{y} = \tilde{y}(u_{n+1}) = \tilde{y}(u_{n+1}; x, t) \in W(0, T)$ , которая  $\forall v(x) \in V_0$  удовлетворяет равенствам

$$\int_{\Omega} \frac{d\tilde{y}}{dt} v dx + a(u_n; \tilde{y}, v) = l(u_n, \Delta u_n; v), \quad t \in (0, T), \quad (26)$$

$$\tilde{y}|_{t=0} = y_0, \quad x \in \Omega, \quad (27)$$

где

$$l(u_n, \Delta u_n; v) = (f, v) + \Delta u_n \left( \int_{\Omega} \frac{\partial^2 y(u_n)}{\partial x^2} v dx + \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} v \Big|_{x=0} - \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} v \Big|_{x=l} \right) + \beta v(0) + \beta_1 v(l).$$

Тогда

$$\forall \lambda \in (0, 1) \bar{y}(u_n + \lambda \Delta u_n) - \bar{y}(u_n) \approx \bar{\tilde{y}}(u_n + \lambda \Delta u_n) - \bar{y}(u_n) = \lambda (\bar{\tilde{y}}(u_{n+1}) - \bar{y}(u_n)),$$

где

$$\bar{y}(u_n) = \left\{ y(u_n; 0, t), u_n \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} \Big|_{\Omega_0} \right\}, \quad \bar{\tilde{y}}(u_{n+1}) = \left\{ \tilde{y}(u_{n+1}; 0, t), u_n \frac{\partial \tilde{y}(u_{n+1})}{\partial x} \Big|_{\Omega_0} \right\}.$$

Следовательно,

$$\langle J'_{u_n}, \Delta u_n \rangle = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{J(u_n + \lambda \Delta u_n) - J(u_n)}{\lambda} \approx (\bar{y}(u_n) - \bar{f}, \bar{\tilde{y}}(u_{n+1}) - \bar{y}(u_n))_{\mathcal{H}}. \quad (28)$$

На каждом шаге определения  $(n+1)$ -го приближения  $u_{n+1}$  решения  $u \in \mathcal{U}$  сопряженная задача имеет вид

$$-\left( \frac{\partial \psi}{\partial t}, z \right) + a(u_n; \psi, z) = (y(u_n; 0, t) - z_{g_1}(t))z(0) + \int_{\Omega_0} \left( u_n \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} - z_{g_2} \right) u_n \frac{\partial z}{\partial x} dx, \quad (29)$$

$$t \in (0, T), \quad \psi|_{t=T} = 0, \quad x \in \Omega.$$

Выбирая в (29)  $z = \tilde{y}(u_{n+1}) - y(u_n)$ , на основании (28) с учетом (25)–(27) получаем

$$\langle J'_{u_n}, \Delta u_n \rangle \approx \Delta u_n \int_0^T \left( \int_{\Omega} \frac{\partial^2 y(u_n)}{\partial x^2} \psi dx + \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} \psi \Big|_{x=0} - \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} \psi \Big|_{x=l} \right) dt.$$

Следовательно,  $J'_{u_n} \approx \tilde{\psi}_n$ , где

$$\tilde{\psi}_n = \int_0^T \left( \int_{\Omega} \frac{\partial^2 y(u_n)}{\partial x^2} \psi dx + \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} \psi \Big|_{x=0} - \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} \psi \Big|_{x=l} \right) dt, \quad \|J'_{u_n}\| = |\tilde{\psi}|.$$

**Параметрическая идентификация коэффициента теплопроводности.** Пусть в задаче (1)–(4), (24) коэффициент теплопроводности  $k = k(x) = u$  — переменный и ищется в виде

$$u = \sum_{i=1}^m \alpha_i \varphi_i(x) > 0, \quad (30)$$

где  $\{\varphi_i(x)\}_{i=1}^m$  — система известных линейно независимых функций на отрезке  $[0, l]$ . Здесь искомым есть вектор  $\alpha = \{\alpha_i\}_{i=1}^m \in \mathcal{U} = R_+^m$ . Тогда имеем  $J'_{u_n} = \tilde{\psi}_n$ , где

$$\tilde{\psi}_n = \{\tilde{\psi}_n^i\}_{i=1}^m, \quad \tilde{\psi}_n^i = \int_0^T \left( \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left( \varphi_i \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} \right) \psi dx + \varphi_i \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} \psi \Big|_{x=0} - \varphi_i \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} \psi \Big|_{x=l} \right) dt,$$

$$i = \overline{1, m}, \quad \|J'_{u_n}\|^2 \approx \sum_{i=1}^m (\tilde{\psi}_n^i)^2.$$

**Идентификация коэффициента теплопроводности на основе слабой задачи состояния.** Пусть в задаче (24), (25) функция  $\tilde{y}(u_{n+1})$  определена как решение задачи (26), (27), где

$$l(u_n, \Delta u_n; v) = (f, v) - \int_{\Omega} \Delta u_n \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dx + \beta v(0) + \beta_1 v(l).$$

Тогда  $J'_{u_n} \approx \tilde{\psi}_n$ , где

$$\tilde{\psi}_n = - \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{\Omega_T}, \quad \|J'_{u_n}\|^2 \approx \int_0^T \int_{\Omega} \tilde{\psi}_n^2 dx dt.$$

Если  $u \in R_+$ , то  $J'_{u_n} = \tilde{\psi}_n$ , где

$$\tilde{\psi}_n = - \int_0^T \int_{\Omega} \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx dt.$$

Если  $u$  ищется в виде (30), то  $J'_{u_n} \approx \tilde{\psi}_n$ , где

$$\tilde{\psi}_n = \{\tilde{\psi}_n^i\}_{i=1}^m, \quad \tilde{\psi}_n^i = - \int_0^T \int_{\Omega} \varphi_i \frac{\partial y(u_n)}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx dt, \quad \|J'_{u_n}\|^2 \approx \sum_{i=1}^m (\tilde{\psi}_n^i)^2.$$

1. Сергиенко И. В., Дейнека В. С. Оптимальное управление системой, описываемой параболическим уравнением с условиями сопряжения // Пробл. управления и информатики. – 2002. – № 4. – С. 37–56.
2. Sergienko I. V., Deineka V. S. Optimal control of distributed systems with conjugation conditions. – New York: Kluwer, 2005. – 400 p.
3. Дейнека В. С., Сергиенко И. В. Анализ многокомпонентных распределенных систем и оптимальное управление. – Киев: Наук. думка, 2007. – 703 с.
4. Сергиенко И. В., Дейнека В. С. Решение комбинированных обратных задач для параболических многокомпонентных распределенных систем // Кибернетика и систем. анализ. – 2007. – № 5. – С. 48–71.
5. Сергиенко И. В., Дейнека В. С. Системный анализ многокомпонентных распределенных систем. – Киев: Наук. думка, 2009. – 640 с.
6. Лионс Ж.-Л. Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частными производными. – Москва: Мир, 1972. – 414 с.
7. Ладыженская О. А., Уральцева Н. Н. Линейные и квазилинейные уравнения эллиптического типа. – Москва: Наука, 1973. – 576 с.
8. Алифанов О. М., Артюхин Е. А., Румянцев С. В. Экстремальные методы решения некорректных задач. – Москва: Наука, 1988. – 288 с.

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

Поступило в редакцию 05.03.2012

Академік НАН України **В. С. Дейнека**

### **Оптимальне керування нестаціонарним тепловим процесом та ідентифікація параметрів середовища при відомих теплових потоках**

*Досліджено питання оптимального керування станом параболическої системи з квадратичним функціоналом якості при спостереженнях за слідом розв'язку та його похідною. Отримані явні вирази градієнтів функціонала-нев'язки для ідентифікації потужності теплового потоку і коефіцієнта теплопровідності.*

Academician of the NAS of Ukraine **V. S. Deineka**

### **Optimal control over the unsteady thermal process and identification of parameters of a medium at the known heat flows**

*The problem of optimal control over the state of the parabolic system with quadratic functional quality under the observation of the trace of a solution and its derivative is considered. The explicit expressions of gradients of the residual functional for the identification of the heat flow rate and the coefficient of heat conductivity are obtained.*

О. М. Литвин, О. П. Нечуйвітер

## Наближене обчислення коефіцієнтів Фур'є функцій трьох змінних з використанням сплайн-інтерфлетації на класі диференційовних функцій

(Представлено академіком НАН України І. В. Сергієнком)

Досліджуються кубатурні формули обчислення коефіцієнтів Фур'є функцій трьох змінних з використанням сплайн-інтерфлетації на класі диференційовних функцій. Інформацію про функцію задано її слідами на системі взаємно перпендикулярних площин, ліній та значеннями функції у вузлових точках. Отримано оцінки похибки кубатурних формул.

Сучасні задачі цифрової обробки сигналів потребують розв'язку за допомогою інформаційних операторів різних типів. Це пов'язано з тим, що як дані можуть виступати значення функції у вузлових точках, сліди функції на лініях або площинах, інтеграли від наближеної функції вздовж вибраної системи ліній або площин, що перетинають досліджуваний об'єкт. Ефективним у розв'язанні таких задач став апарат інтерлінації та інтерфлетації функцій [1]. Зокрема, в [2] викладено загальний підхід до побудови операторів фінитного тривимірного дискретно-неперервного перетворення Фур'є на основі методу Файлона, трілінійних сплайнів (лінійних за кожною змінною) та сплайн-інтерфлетації на класі диференційовних функцій у випадку, коли задано значення функції у вузлах. В [3, 4] наведено алгоритм для отримання більш точної оцінки похибки наближення 3D коефіцієнтів Фур'є кубатурними формулами, що в своїй побудові використовують оператори сплайн-інтерфлетації.

Метою даної роботи є наведення та дослідження кубатурних формул наближеного обчислення 3D коефіцієнтів Фур'є у випадках, коли як дані задано значення функції у вузлах, сліди функції на системі взаємно перпендикулярних ліній, системі взаємно перпендикулярних площин на класі дійсних функцій трьох змінних, визначених на  $G = [0, 1]^3$  і таких, що  $|f^{(r,0,0)}(x, y, z)| \leq M$ ,  $|f^{(0,r,0)}(x, y, z)| \leq M$ ,  $|f^{(0,0,r)}(x, y, z)| \leq M$ ,  $|f^{(r,r,0)}(x, y, z)| \leq \overline{M}$ ,  $|f^{(r,0,r)}(x, y, z)| \leq \overline{M}$ ,  $|f^{(0,r,r)}(x, y, z)| \leq \overline{M}$ ,  $|f^{(r,r,r)}(x, y, z)| \leq \widetilde{M}$ ,  $r = 1, 2$ . Для досягнення мети поставлено таку задачу: побудувати кубатурні формули наближеного обчислення 3D коефіцієнтів Фур'є, зокрема для

$$I_1^3(m, n, p) = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 f(x, y, z) \sin 2\pi mx \sin 2\pi ny \sin 2\pi pz dx dy dz,$$

на основі сплайн-інтерфлетації функцій у випадку різних інформаційних операторів; отримати оцінку похибки наближення запропонованих кубатурних формул.

Введемо позначення

$$h_{10}(x) = \begin{cases} \frac{x - x_1}{-\Delta}, & x_0 \leq x < x_1, \\ 0, & x \geq x_1, \end{cases} \quad h_{1\ell}(x) = \begin{cases} 0, & x \leq x_{\ell-1}, \\ \frac{x - x_{\ell-1}}{\Delta}, & x_{\ell-1} < x \leq x_{\ell}, \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
h_{1k}(x) &= \begin{cases} 0, & x \leq x_{k-1}, \\ \frac{x - x_{k-1}}{\Delta}, & x_{k-1} < x < x_k, \\ \frac{x - x_{k+1}}{-\Delta}, & x_k \leq x < x_{k+1}, \\ 0, & x \geq x_{k+1}, \end{cases} & k = \overline{1, \ell - 1}, \quad x_k = k\Delta, \quad \Delta = \frac{1}{\ell}, \\
\tilde{h}_{10}(x) &= \begin{cases} \frac{x - \tilde{x}_1}{-\Delta_1}, & \tilde{x}_0 \leq x < \tilde{x}_1, \\ 0, & x \geq \tilde{x}_1, \end{cases} & \tilde{h}_{1\ell^{3/2}}(x) = \begin{cases} 0, & x \leq \tilde{x}_{\ell^{3/2}-1}, \\ \frac{x - \tilde{x}_{\ell^{3/2}-1}}{\Delta}, & \tilde{x}_{\ell^{3/2}-1} < x \leq \tilde{x}_{\ell^{3/2}}, \end{cases} \\
\tilde{h}_{1\tilde{k}}(x) &= \begin{cases} 0, & x \leq \tilde{x}_{\tilde{k}-1}, \\ \frac{x - \tilde{x}_{\tilde{k}-1}}{\Delta_1}, & \tilde{x}_{\tilde{k}-1} < x < \tilde{x}_{\tilde{k}}, \\ \frac{x - \tilde{x}_{\tilde{k}+1}}{-\Delta_1}, & \tilde{x}_{\tilde{k}} \leq x < \tilde{x}_{\tilde{k}+1}, \\ 0, & x \geq \tilde{x}_{\tilde{k}+1}, \end{cases} & \tilde{k} = \overline{1, \ell^{3/2} - 1}, \quad \tilde{x}_{\tilde{k}} = \tilde{k}\Delta_1, \quad \Delta_1 = \frac{1}{\ell^{3/2}}, \\
\bar{h}_{10}(x) &= \begin{cases} \frac{x - \bar{x}_1}{-\Delta_2}, & \bar{x}_0 \leq x < \bar{x}_1, \\ 0, & x \geq \bar{x}_1, \end{cases} & \bar{h}_{1\ell^3}(x) = \begin{cases} 0, & x \leq \bar{x}_{\ell^3-1}, \\ \frac{x - \bar{x}_{\ell^3-1}}{\Delta_2}, & \bar{x}_{\ell^3-1} < x \leq \bar{x}_{\ell^3}, \end{cases} \\
\bar{h}_{1\bar{k}}(x) &= \begin{cases} 0, & x \leq \bar{x}_{\bar{k}-1}, \\ \frac{x - \bar{x}_{\bar{k}-1}}{\Delta_2}, & \bar{x}_{\bar{k}-1} < x < \bar{x}_{\bar{k}}, \\ \frac{x - \bar{x}_{\bar{k}+1}}{-\Delta_2}, & \bar{x}_{\bar{k}} \leq x < \bar{x}_{\bar{k}+1}, \\ 0, & x \geq \bar{x}_{\bar{k}+1}, \end{cases} & \bar{k} = \overline{1, \ell^3 - 1}, \quad \bar{x}_{\bar{k}} = \bar{k}\Delta_2, \quad \Delta_2 = \frac{1}{\ell^3}.
\end{aligned}$$

Аналогічно визначаються функції

- 1)  $h_{2j}(y)$ ,  $j = \overline{0, \ell}$ ,  $h_{3s}(z)$ ,  $s = \overline{0, \ell}$ ,  $y_j = j\Delta$ ,  $z_s = s\Delta$ ,  $\Delta = 1/\ell$ ;
- 2)  $\tilde{h}_{2\tilde{j}}(y)$   $\tilde{j} = \overline{0, \ell^{3/2}}$ ,  $\tilde{h}_{3\tilde{s}}(z)$ ,  $\tilde{s} = \overline{0, \ell^{3/2}}$ ,  $\tilde{y}_{\tilde{j}} = \tilde{j}\Delta_1$ ,  $\tilde{z}_{\tilde{s}} = \tilde{j}\Delta_1$ ,  $\Delta_1 = 1/\ell^{3/2}$ ;
- 3)  $\bar{h}_{2\bar{j}}(y)$   $\bar{j} = \overline{0, \ell^3}$ ,  $\bar{h}_{3\bar{s}}(z)$ ,  $\bar{s} = \overline{0, \ell^3}$ ,  $\bar{y}_{\bar{j}} = \bar{j}\Delta_2$ ,  $\bar{z}_{\bar{s}} = \bar{s}\Delta_2$ ,  $\Delta_2 = 1/\ell^3$ .

Розглянемо оператори

$$\begin{aligned}
O_1 f(x, y, z) &= \sum_{k=0}^{\ell} f(x_k, y, z) h_{1k}(x), & O_2 f(x, y, z) &= \sum_{j=0}^{\ell} f(x, y_j, z) h_{2j}(y), \\
O_3 f(x, y, z) &= \sum_{s=0}^{\ell} f(x, y, z_s) h_{3s}(z), & \tilde{O}_1 f(x, y, z) &= \sum_{\tilde{k}=0}^{\ell^{3/2}} f(\tilde{x}_{\tilde{k}}, y, z) h_{1\tilde{k}}(x), \\
\tilde{O}_2 f(x, y, z) &= \sum_{\tilde{j}=0}^{\ell^{3/2}} f(x, \tilde{y}_{\tilde{j}}, z) \tilde{h}_{2\tilde{j}}(y), & \tilde{O}_3 f(x, y, z) &= \sum_{\tilde{s}=0}^{\ell^{3/2}} f(x, y, \tilde{z}_{\tilde{s}}) \tilde{h}_{3\tilde{s}}(z),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{O}_1 f(x, y, z) &= \sum_{\bar{k}=0}^{\ell^3} f(\bar{x}_{\bar{k}}, y, z) h_{1\bar{k}}(x), & \bar{O}_2 f(x, y, z) &= \sum_{\bar{j}=0}^{\ell^3} f(x, \bar{y}_{\bar{j}}, z) \bar{h}_{2\bar{j}}(y), \\ \bar{O}_3 f(x, y, z) &= \sum_{\bar{s}=0}^{\ell^3} f(x, y, \bar{z}_{\bar{s}}) \bar{h}_{3\bar{s}}(z).\end{aligned}$$

**Означення 1.** Під слідом функції  $f(x, y, z)$  на лініях розуміємо

$$f(x_k, y_j, z), \quad 0 \leq z \leq 1, \quad f(x_k, y, z_s), \quad 0 \leq y \leq 1, \quad f(x, y_j, z_s), \quad 0 \leq x \leq 1.$$

**Означення 2.** Під слідом функції  $f(x, y, z)$  на площинах розуміємо

$$\begin{aligned}f(x_k, y, z), & \quad 0 \leq y \leq 1, \quad 0 \leq z \leq 1, & f(x, y_j, z), & \quad 0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq z \leq 1, \\ f(x, y, z_s), & \quad 0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq y \leq 1.\end{aligned}$$

**Лема 1** [1]. *Оператор сплайн-інтерфлетації*

$$\begin{aligned}O f(x, y, z) &= O_1 f(x, y, z) + O_2 f(x, y, z) + O_3 f(x, y, z) - O_1 O_2 f(x, y, z) - \\ &- O_2 O_3 f(x, y, z) - O_1 O_3 f(x, y, z) + O_1 O_2 O_3 f(x, y, z)\end{aligned}$$

має властивість  $|f(x, y, z) - O f(x, y, z)| = O(1/\ell^{3r})$ .

**Лема 2** [1]. *Оператор сплайн-інтерлінації, побудований на основі інтерфлетації*

$$\begin{aligned}\tilde{O} f(x, y, z) &= O_1 \tilde{O}_2 f(x, y, z) + O_1 \tilde{O}_3 f(x, y, z) - O_1 \tilde{O}_2 \tilde{O}_3 f(x, y, z) + O_2 \tilde{O}_1 f(x, y, z) + \\ &+ O_2 \tilde{O}_3 f(x, y, z) - O_2 \tilde{O}_1 \tilde{O}_3 f(x, y, z) + O_3 \tilde{O}_1 f(x, y, z) + O_3 \tilde{O}_2 f(x, y, z) - \\ &- O_3 \tilde{O}_1 \tilde{O}_2 f(x, y, z) - O_1 O_2 f(x, y, z) - O_1 O_3 f(x, y, z) - O_2 O_3 f(x, y, z) + \\ &+ O_1 O_2 O_3 f(x, y, z),\end{aligned}$$

має властивість  $|f(x, y, z) - \tilde{O} f(x, y, z)| = O(1/\ell^{3r})$ .

**Лема 3** [1]. *Оператор сплайн-інтерполяції, побудований на основі інтерфлетації*

$$\begin{aligned}\bar{O} f(x, y, z) &= O_1 \bar{O}_2 \bar{O}_3 f(x, y, z) + O_1 \bar{O}_3 \bar{O}_2 f(x, y, z) - O_1 \bar{O}_2 \bar{O}_3 f(x, y, z) + \\ &+ O_2 \bar{O}_1 \bar{O}_3 f(x, y, z) + O_2 \bar{O}_3 \bar{O}_1 f(x, y, z) - O_2 \bar{O}_1 \bar{O}_3 f(x, y, z) + O_3 \bar{O}_1 \bar{O}_2 f(x, y, z) + \\ &+ O_3 \bar{O}_2 \bar{O}_1 f(x, y, z) - O_3 \bar{O}_1 \bar{O}_2 f(x, y, z) - O_1 O_2 \bar{O}_3 f(x, y, z) - O_1 O_3 \bar{O}_2 f(x, y, z) - \\ &- O_2 O_3 \bar{O}_1 f(x, y, z) + O_1 O_2 O_3 f(x, y, z),\end{aligned}$$

має властивість  $|f(x, y, z) - \bar{O} f(x, y, z)| = O(1/\ell^{3r})$ .

Нехай

$$G_{1k}(x, \xi, r) = \begin{cases} \frac{x_{k+1} - x}{x_{k+1} - x_k} \frac{(x_k - \xi)^{r-1}}{(r-1)!}, & x_k < \xi < x, \\ \frac{x_k - x}{x_{k+1} - x_k} \frac{(x_{k+1} - \xi)^{r-1}}{(r-1)!}, & x < \xi < x_{k+1}, \end{cases}$$

$$\tilde{G}_{1\tilde{k}}(x, \xi, r) = \begin{cases} \frac{\tilde{x}_{k+1} - x}{\tilde{x}_{k+1} - \tilde{x}_k} \frac{(\tilde{x}_k - \xi)^{r-1}}{(r-1)!}, & \tilde{x}_k < \xi < x, \\ \frac{\tilde{x}_k - x}{\tilde{x}_{k+1} - \tilde{x}_k} \frac{(x_{k+1} - \xi)^{r-1}}{(r-1)!}, & x < \xi < \tilde{x}_{k+1}, \end{cases}$$

$$\bar{G}_{1\bar{k}}(x, \xi, r) = \begin{cases} \frac{\bar{x}_{k+1} - x}{\bar{x}_{k+1} - \bar{x}_k} \frac{(\bar{x}_k - \xi)^{r-1}}{(r-1)!}, & \bar{x}_k < \xi < x, \\ \frac{\bar{x}_k - x}{\bar{x}_{k+1} - \bar{x}_k} \frac{(\bar{x}_{k+1} - \xi)^{r-1}}{(r-1)!}, & x < \xi < \bar{x}_{k+1}, \end{cases}$$

а функції  $G_{2j}(y, \eta, r)$ ,  $\tilde{G}_{2\tilde{j}}(y, \eta, r)$ ,  $\bar{G}_{2\bar{j}}(y, \eta, r)$ ,  $G_{3s}(z, \varsigma, r)$ ,  $\tilde{G}_{3\tilde{s}}(z, \varsigma, r)$ ,  $\bar{G}_{3\bar{s}}(z, \varsigma, r)$ ,  $r = 1, 2$ , визначаються аналогічно.

**Лема 4** [1]. *Справедливі такі рівності:*

- 1)  $f(x, y, z) - Of(x, y, z) =$ 

$$= \int_{x_k}^{x_{k+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{z_s}^{z_{s+1}} f^{(r,r,r)}(\xi, \eta, \varsigma) G_{1k}(x, \xi, r) G_{2j}(y, \eta, r) G_{3s}(z, \varsigma, r) d\xi d\eta d\varsigma;$$
- 2)  $(O_1 - O_1\tilde{O}_2 - O_1\tilde{O}_3 + O_1\tilde{O}_2\tilde{O}_3)f(x, y, z) =$ 

$$= \int_{\tilde{y}_j}^{\tilde{y}_{j+1}} \int_{\tilde{z}_s}^{\tilde{z}_{s+1}} f^{(0,r,r)}(x_k, \eta, \zeta) \tilde{G}_{2\tilde{j}}(y, \eta, r) \tilde{G}_{3\tilde{s}}(z, \zeta, r) d\eta d\zeta;$$
- 3)  $(O_1O_2 - O_1O_2\bar{O}_3)f(x, y, z) = \int_{\bar{x}_k}^{\bar{x}_{k+1}} f^{(r,0,0)}(\xi, y_j, \tilde{z}_s) \bar{G}_{1\bar{k}}(x, \xi, r) d\xi.$

**Лема 5** [5]. *Справедливі такі нерівності:*

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} \int_{x_k}^{x_{k+1}} |G_1(x, \xi, r)| d\xi dx \leq \frac{2\Delta^{r+1}}{(r+2)!}, \quad \int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} |G_{2j}(y, \eta, r)| d\eta dy \leq \frac{2\Delta^{r+1}}{(r+2)!},$$

$$\int_{z_s}^{z_{s+1}} \int_{z_s}^{z_{s+1}} |G_{3s}(z, \varsigma, r)| d\varsigma dz \leq \frac{2\Delta^{r+1}}{(r+2)!}.$$

Для обчислення інтегралу  $I_1^3(m, n, p)$  у випадку, коли відомі сліди функції на системі перпендикулярних площин, пропонується формула

$$\Phi_1^3(m, n, p) = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 Of(x, y, z) \sin 2\pi mx \sin 2\pi ny \sin 2\pi pz dx dy dz.$$

**Теорема 1.** Для кубатурної формули  $\Phi_1^3(m, n, p)$  обчислення  $I_1^3(m, n, p)$  справедлива оцінка

$$|I_1^3(m, n, p) - \Phi_1^3(m, n, p)| \leq \frac{8\widetilde{M}}{[(r+2)!]^3 \ell^{3r}}.$$

Якщо ж відомі сліди функції на системі взаємно перпендикулярних ліній, то для обчислення інтегралу  $I_1^3(m, n, p)$  слід використовувати формулу

$$\widetilde{\Phi}_1^3(m, n, p) = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \widetilde{O}f(x, y, z) \sin 2\pi mx \sin 2\pi ny \sin 2\pi rz dx dy dz.$$

**Теорема 2.** Для кубатурної формули  $\widetilde{\Phi}_1^3(m, n, p)$  обчислення  $I_1^3(m, n, p)$  справедлива така оцінка:

$$|I_1^3(m, n, p) - \widetilde{\Phi}_1^3(m, n, p)| \leq \left( \frac{8\widetilde{M}}{[(r+2)!]^3} + \frac{12\overline{M}}{[(r+2)!]^2} \right) \frac{1}{\ell^{3r}}.$$

У випадку, коли відомі значення функції у вузлах, для обчислення інтегралу  $I_1^3(m, n, p)$  побудовано формулу

$$\overline{\Phi}_1^3(m, n, p) = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \overline{O}f(x, y, z) \sin 2\pi mx \sin 2\pi ny \sin 2\pi rz dx dy dz.$$

**Теорема 3.** Для кубатурної формули  $\overline{\Phi}_1^3(m, n, p)$  обчислення  $I_1^3(m, n, p)$  справедлива оцінка

$$|I_1^3(m, n, p) - \overline{\Phi}_1^3(m, n, p)| \leq \left( \frac{8\widetilde{M}}{[(r+2)!]^3} + \frac{12\overline{M}}{[(r+2)!]^2} + \frac{18M}{(r+2)!} \right) \frac{1}{\ell^{3r}}.$$

Таким чином, в роботі пропонуються та досліджуються кубатурні формули обчислення 3D коефіцієнтів Фур'є з використанням операторів сплайн-інтерфлетачії на деякому класі диференційовних функцій. Інформацію про функцію задано слідами на системі взаємно перпендикулярних площин, слідами на системі взаємно перпендикулярних ліній та значеннями функції у вузлових точках. У всіх випадках одержано оцінку похибки наближення 3D коефіцієнтів Фур'є кубатурними формулами. Питання якості кубатурних формул, тобто чи побудовані кубатурні формули є оптимальними або близькими до них, буде наступним етапом досліджень.

1. Литвин О. М. Інтерлінація функцій та деякі її застосування. – Харків: Основа, 2002. – 544 с.
2. Литвин О. М., Удовиченко В. М. Тривимірні фінитні перетворення Фур'є та Хартлі з використанням інтерфлетачії функцій // Вестн. НТУ “ХПИ”. Сб. науч. тр. Темат. вып. “Автоматика и приборостроение, 38’ 2005”. – Харьков, 2005. – С. 90–130.
3. Литвин О. М., Гулік Л. І. Інтерфлетачія функцій при розв’язуванні тривимірної задачі теплопровідності. – Київ: Наук. думка, 2011. – 210 с.
4. Нечуйвітер О. П. Про похибку наближеного обчислення 3 D коефіцієнтів Фур'є кубатурними формулами з використанням інтерполянта, побудованого на основі сплайн-інтерфлетачії // Пр. міжнар. молод. мат. шк. “Питання оптимізації обчислень (ПОО-XXXVII)”. – Київ: Ін-т кібернетики ім. В. М. Глушкова НАН України, 2011. – С. 133.



5. Литвин О. М., Нечуйвигер О. П. Кубатурна формула для обчислення 2D коефіцієнтів Фур'є з використанням інтерлінації функцій // Вісн. Харк. нац. ун-ту ім. В. Н. Каразіна. Зб. наук. пр. Сер. Мат. моделювання. Інформ. технології. Автоматиз. системи управління. – 2010. – № 926. – С. 153–160.

Українська інженерно-педагогічна академія, Харків

Надійшло до редакції 24.11.2011

**О. Н. Литвин, О. П. Нечуйвигер**

**Приближенное вычисление коэффициентов Фурье функций трех переменных с использованием сплайн-интерфлатации на классе дифференцированных функций**

*Исследуются кубатурные формулы вычисления коэффициентов Фурье функций трех переменных с использованием сплайн-интерфлатации на классе дифференцируемых функций. Информация о функции задана ее следами на системе взаимно перпендикулярных плоскостей и линий и значениями функции в узловых точках. Получены оценки погрешности кубатурных формул.*

**O. N. Lytvyn, O. P. Nechuiiviter**

**The approximate calculation of 3D Fourier coefficients of the functions of three variables by using the spline-interflatation on a class of differentiable functions**

*With the use of the spline-interflatation on a class of differentiable functions, the cubature formulas for Fourier coefficients of the functions of three variables are studied. The information about a function is set by its traces on a system of mutually perpendicular planes and lines, as well as by the values of the function at knots. The estimates of errors of the cubature formulas are obtained.*

Член-кореспондент НАН України С. І. Ляшко, Д. А. Ключин,  
Г. М. Стещенко

## Якісне та чисельне дослідження сингулярного керування конвективною дифузією суміші радіоізоотопів

*Розглянуто задачу оптимального керування переносом суміші радіоізоотопів. Доведено існування і єдиність оптимального керування, а також побудовано алгоритм розв'язання відповідної задачі оптимального керування.*

В наш час у всьому світі існує велика кількість могильників радіоактивних відходів, але питання математичного моделювання конвективної дифузії суміші ізоотопів з урахуванням явища філіації розкрито не повністю. В основних роботах на цю тему [1–4] досліджено існування слабкого розв'язку нелінійної початково-крайової задачі, що описує перенос радіоактивних речовин у пористому середовищі з урахуванням явища філіації. Водночас досі не було розглянуто задачу про ідентифікацію координат і потужності точкових джерел забруднення.

**Постановка задачі.** Для того щоб перейти до задачі оптимального керування, розглянемо таку постановку:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial t} + C_{u_1} + D_{u_1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -a_1(x) & \frac{\partial}{\partial t} + C_{u_2} + D_{u_2} & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{\partial}{\partial t} + C_{u_{Y-1}} + D_{u_{Y-1}} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & -a_{Y-1}(x) & \frac{\partial}{\partial t} + C_{u_Y} + D_{u_Y} \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} u_1(x, t) \\ u_2(x, t) \\ \dots \\ u_Y(x, t) \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} q_{11} & q_{21} & \dots & q_{E1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ q_{1Y} & q_{2Y} & \dots & q_{EY} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \delta(x - r_1) \\ \delta(x - r_2) \\ \dots \\ \delta(x - r_E) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

де

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_s}{\partial t} + C_{u_s} u_s + D_{u_s} u_s = \\ = \frac{\partial u_s}{\partial t} - \sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( a_{sij}(x) \frac{\partial u_s}{\partial x_i} \right) + \sum_{i=1}^2 a_{si}(x) \frac{u_s}{\partial x_i} + a_s(x) u_s, \quad s = \overline{1, \dots, Y}, \\ W_{EY}(t) = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{21} & \dots & q_{E1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ q_{1Y} & q_{2Y} & \dots & q_{EY} \end{pmatrix}, \quad F_E(x) = \begin{pmatrix} \delta(x - r_1) \\ \delta(x - r_2) \\ \dots \\ \delta(x - r_E) \end{pmatrix} - \end{aligned}$$

відповідні матриця і вектор правих частин;  $\delta(x)$  —  $\delta$ -функція Дірака. В цих позначеннях стан системи задається крайовими умовами:

$$u_s(x, t) = 0, \quad x \in \partial\Omega, \quad s = \overline{1, \dots, Y}, \quad u_s(x, 0) = 0, \quad s = \overline{1, \dots, Y}. \quad (2)$$

Оператори дифузійного переносу  $D_{u_1}, D_{u_2}, \dots, D_{u_Y}$  є самоспряженими і додатно визначеними в просторі  $\Omega$ :  $D_s = D_s^* \geq k_0 E$ ,  $s = \overline{1, \dots, Y}$ , де  $E$  — тотожний оператор.

Оператори конвективного переносу  $C_{u_1}, C_{u_2}, \dots, C_{u_Y}$  є кососиметричними, тобто  $C_s^* = -C_s$ ,  $s = \overline{1, \dots, Y}$  в  $L_2(Q)$ .

Припускаючи середовище нестискненим, маємо:

$$\sum_{i=1}^2 (a_{si}(x))_{x_i} = 0, \quad s = \overline{1, \dots, Y}.$$

Точки  $x = r_p$ ,  $p = \overline{1, \dots, E}$ ,  $E \in N$  визначають положення джерел, потужності яких (функції  $q_{ps}(t)$ ,  $s = \overline{1, \dots, Y}$ ,  $p = \overline{1, \dots, E}$ ) невідомі. Додаткова інформація інтерпретується як усереднення вимірювання  $U(x, t)$  в околі деяких окремих точок  $z_m \in \Omega$ ,  $m = 1, 2, \dots, M$ . З урахуванням похибки вимірів маємо:

$$U(x, t) = \begin{pmatrix} u_1(z_m, t) \\ u_2(z_m, t) \\ \dots \\ u_Y(z_m, t) \end{pmatrix} \approx \varphi_m(t) = \begin{pmatrix} \varphi_{u_1 m}(t) \\ \varphi_{u_2 m}(t) \\ \dots \\ \varphi_{u_Y m}(t) \end{pmatrix}, \quad m = 1, 2, \dots, M. \quad (3)$$

Для дослідження в просторах  $H$  та  $L_2(Q)$  введемо скалярний добуток і такі норми:

$$\|u\|_{L_2(Q)}^2 = \int_Q u^2 dQ, \quad (u, v)_{L_2(Q)} = \int_Q uv dQ,$$

$$\|u\|_H^2(Q) = \int_Q \left( (u)_t^2 + \sum_{i=1}^2 (u)_{x_i}^2 + \sum_{i,j=1}^2 (u)_{x_i x_j}^2 \right) dQ$$

та розглянемо простори  $H^K$  та  $(L_2(Q))^K$  вектор-функцій  $U = (u_1, u_2, \dots, u_K)$  та  $H^{K \times M}$  і  $(L_2(Q))^{K \times M}$  матриць-функцій  $U = \begin{pmatrix} u_{11} & \dots & u_{1K} \\ \dots & \dots & \dots \\ u_{M1} & \dots & u_{MK} \end{pmatrix}$ , де  $u_k$  та  $u_{mk}$  належать  $H$  та  $L_2(Q)$  відповідно, і введемо скалярний добуток і норми:

$$(U, V)_{L_2^K} = \sum_{k=1}^K \int_Q u_k v_k dQ, \quad (U, V)_{L_2^{K \times M}} = \sum_{k,m=1}^{K,M} \int_Q u_{km} v_{km} dQ,$$

$$\|U\|_{L_2^K}^2(Q) = \int_Q \sum_{k=1}^K (u_k)^2 dQ, \quad \|U\|_{L_2^{K \times M}}^2(Q) = \int_Q \sum_{k,m=1}^{K,M} (u_{km})^2 dQ,$$

$$\|U\|_{H^K}^2(Q) = \int_Q \sum_{k=1}^K \left( (u_k)_t^2 + \sum_{i=1}^2 (u_k)_{x_i}^2 + \sum_{i,j=1}^2 (u_k)_{x_i x_j}^2 \right) dQ,$$

$$\|U\|_{H^{K \times M}(Q)}^2 = \int_Q \sum_{k,m=1}^{K,M} \left( (u_{km})_t^2 + \sum_{i=1}^2 (u_{km})_{x_i}^2 + \sum_{i,j=1}^2 (u_{km})_{x_i x_j}^2 \right) dQ.$$

Аналогічно для спряженої задачі вводяться простори  $H_+^K$  та  $H_+$ .

За парами  $H, L_2(Q)$  та  $H_+, L_2(Q)$  побудуємо негативні простори  $(H)^*$  та  $(H_+)^*$ , а за парами  $H^K, (L_2(Q))^K$  та  $H_+^K, (L_2(Q))^K$  — негативні простори  $(H_+)^*$  та  $(H_+^K)^*$ , поповнюючи  $L_2(Q)$  та  $(L_2(Q))^K$  за нормами:

$$\|f\|_{(H)^*} = \sup_{\substack{u \in H \\ u \neq 0}} \frac{|(f, u)_{L_2(Q)}|}{\|u\|_H}, \quad \|F\|_{(H^K)^*} = \sup_{\substack{U \in H^K \\ U \neq 0}} \frac{|(F, U)_{(L_2(Q))^K}|}{\|U\|_{H^K}},$$

$$\|F\|_{(H_+^K)^*} = \sup_{\substack{V \in H_+^K \\ V \neq 0}} \frac{|(F, V)_{(L_2(Q))^K}|}{\|V\|_{H_+^K}}, \quad \|f\|_{(H_+)^*} = \sup_{\substack{v \in H_+ \\ v \neq 0}} \frac{|(f, v)_{L_2(Q)}|}{\|v\|_{H_+}}.$$

Нехай керування  $q_{ps}$  належить гільбертовому простору  $L_2(Q)$ . Необхідно визначити  $U(x, t)$  та потужності невідомих джерел  $W_{EY}(t)$ . Функціонал візьмемо у вигляді:

$$J_\alpha(W_{EY}) = \sum_{m=1}^M \int_0^T \left( \varphi_{u_1 m}(t) - \int_\Omega g_{u_1 m} u_1(t, x) dx \right)^2 dt +$$

$$+ \sum_{m=1}^M \int_0^T \left( \varphi_{u_2 m}(t) - \int_\Omega g_{u_2 m} u_2(t, x) dx \right)^2 dt + \dots +$$

$$+ \sum_{m=1}^M \int_0^T \left( \varphi_{u_S m}(t) - \int_\Omega g_{u_S m} u_S(t, x) dx \right)^2 dt + \alpha (\|W_{EY}\|_{H^{E \times Y}})^2, \quad (4)$$

де  $g_{u_s m} = \chi_{\omega_{sm}} / \text{diam } \omega_{sm}$ ,  $s = \overline{1, \dots, Y}$ , — ядро усереднення за область  $\omega_{sm}$ ;  $\chi_{\omega_{sm}}$  — індикаторна функція;  $\alpha > 0$  — параметр регуляризації.

Визначимо функцію  $\chi \in (H^Y)^*$  виразом

$$\chi = \begin{pmatrix} \sum_{m=1}^M g_{u_1 m}(x) \\ \sum_{m=1}^M g_{u_2 m}(x) \\ \dots \\ \sum_{m=1}^M g_{u_Y m}(x) \end{pmatrix},$$

де  $g_{u_1 m}, g_{u_2 m}, \dots, g_{u_Y m}$  — ядра усереднення відповідних компонент вектора  $U$  в околі точки

спостереження. Нехай  $\psi(t) \in (L_2(0, T))^Y$  така, що

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} \psi_{u_1 m}(t) \\ \psi_{u_2 m}(t) \\ \dots \\ \psi_{u_Y m}(t) \end{pmatrix}, \quad \chi\psi(t) = \begin{pmatrix} \sum_{m=1}^M g_{u_1 m}(x)\psi_{u_1 m}(t) \\ \sum_{m=1}^M g_{u_2 m}(x)\psi_{u_2 m}(t) \\ \dots \\ \sum_{m=1}^M g_{u_Y m}(x)\psi_{u_Y m}(t) \end{pmatrix}.$$

Значення  $\alpha$  береться з урахуванням похибок вимірів (3). Оптимальне керування  $W_{EY}^{\text{опт}}(t)$  знаходиться за умови мінімізації функціонала (4):

$$J_\alpha(W_{EY}^{\text{опт}}) = \min_{W_{EY} \in H^{E \times Y}} J_\alpha(W_{EY}), \quad (5)$$

а за розв'язок оберненої задачі візьмемо  $U(x, t) = U(x, t, W_{EY}^{\text{опт}})$  і матрицю  $W_{EY}^{\text{опт}}$ .

Позначимо через  $\langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega$  білінійну форму, побудовану розширенням скалярного добутку в  $L_2(Q)$  за неперервністю до білінійної форми на  $(H)^* \times H$ , а через  $\langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega^Y$  — білінійну форму, що побудована за просторами  $(H^*)^Y$  та  $(H)^Y$ , через  $\langle \cdot, \cdot \rangle_+$  — білінійну форму, побудовану розширенням скалярного добутку в  $L_2(Q)$  за неперервністю до білінійної форми на  $(H_+)^* \times H_+$ .

**Означення 1.**  $U \in (L_2(Q))^Y$  називається слабким розв'язком системи (1)–(2), якщо

$$(U, VL^*)_{(L_2(Q))^Y} = \langle F, V \rangle_+, \quad \forall V \in (H_+^Y).$$

**Розв'язок задачі оптимального керування.** Оскільки стан системи визначається як розв'язок задачі (1)–(2) та справджуються відповідні умови [6], існує єдине оптимальне керування системою (1)–(2).

При користуванні ітераційними методами перехід з  $k$ -ї на  $k+1$ -ту ітерацію здійснюється таким чином.

1. Розв'язується задача для визначення стану системи

$$LU^k = FW_{EY}^k, \quad (6)$$

$$U^k(0) = 0. \quad (7)$$

2. Визначається відповідний спряжений стан системи

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \psi_{u_1}}{\partial t} - C_{u_1} \psi_{u_1} + D_{u_1} \psi_{u_1} - a_1(x) \psi_{u_2} &= 2 \sum_{m=1}^M \left\{ g_{u_1 m} \left( \int_{\Omega} g_{u_1 m} u_1^k dx - \varphi_{u_1 m} \right) \right\}, \\ -\frac{\partial \psi_{u_2}}{\partial t} - C_{u_2} \psi_{u_2} + D_{u_2} \psi_{u_2} - a_2(x) \psi_{u_3} &= 2 \sum_{m=1}^M \left\{ g_{u_2 m} \left( \int_{\Omega} g_{u_2 m} u_2^k dx - \varphi_{u_2 m} \right) \right\}, \\ &\dots \dots \dots \\ -\frac{\partial \psi_{u_Y}}{\partial t} - C_{u_Y} \psi_{u_Y} + D_{u_Y} \psi_{u_Y} &= 2 \sum_{m=1}^M \left\{ g_{u_Y m} \left( \int_{\Omega} g_{u_Y m} u_Y^k dx - \varphi_{u_Y m} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (8)$$

$$T > t \geq 0, \quad \psi^k(T) = 0. \quad (9)$$

3. Визначається нове наближення для інтенсивності джерел

$$\frac{W_{u_s}^{k+1} - W_{u_s}^k}{s_{k+1}} \psi_{u_s} + \alpha W_{u_s} = 0, \quad s = \overline{1, \dots, Y}. \quad (10)$$

Таким чином, в даній роботі розглянуто задачу оптимального керування конвективною дифузиею суміші радіоізотопів. Доведено існування і єдиність розв'язку поставленої задачі. Запропоновано алгоритм для використання чисельних методів для знаходження розв'язку даної задачі.

1. Choquet C. Radionuclide transport model with wells // Asymptotic Analysis. – 2004. – **37**. – P. 57–78.
2. Choquet C. Existence result for a radionuclide transport model with unbounded viscosity // J. of Math. and Fluid Mechanics. – 2004. – **6**. – P. 365–388.
3. Choquet C., Zimmermann S. Study of a finite volume-finite element scheme for a nuclear transport model. – arXiv:0704.1286.
4. Douglas J. Jr., Spagnuolo A. The transport of nuclear contamination in fractured porous media // J. of Korean Mathematical Society. – 2001. – **38**. – P. 723–761.
5. Ляшко С. И. Моделирование и оптимизация подземного массопереноса. – Киев: Наук. думка, 1998. – 240 с.
6. Ляшко С. И. Обобщенное управление линейными системами. – Киев: Наук. думка, 1998. – 472 с.

Київський національний університет  
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 09.11.2011

Член-корреспондент НАН України С. И. Ляшко, Д. А. Ключин,  
Г. Н. Стещенко

### Качественное и численное исследование сингулярного управления конвективной диффузией смеси радиоизотопов

*В работе исследована задача оптимального управления переносом смеси радиоизотопов. Доказано существование и единственность оптимального управления, а также разработан алгоритм решения соответствующей задачи оптимального управления.*

Corresponding Member of the NAS of Ukraine S. I. Lyashko, D. A. Klyushin,  
G. M. Steshenko

### The qualitative numerical investigation of the singular control over the convection-diffusion of a radioisotope mixture

*The optimal control problem for the transport of a radioisotope mixture is investigated. The theorem on existence and uniqueness of an optimal control is proved, and the algorithm for solving the optimal control problem is developed.*



УДК 531.36

© 2012

Академик НАН України А. А. Мартынюк,  
Ю. А. Мартынюк-Черниенко

### О робастной устойчивости импульсных систем с последствием

*Рассматривается класс неточных механических систем, математическое описание которых представлено так называемыми гибридными системами уравнений, т. е. системами, состоящими из двух типов уравнений, связанных между собой. А именно, рассматриваются системы с последствием при импульсных возмущениях, для которых развит прямой метод Ляпунова на основе вспомогательных функций, заданных на произведении пространств.*

Рассматриваемый класс систем имеет многие приложения (см. [1–6] и приведенную библиографию). Как и в случае импульсной системы без последствия, импульсное возмущение может стабилизировать движение системы с последствием даже в том случае, когда обе компоненты системы имеют неустойчивое решение. В работе приведены основные теоремы прямого метода Ляпунова, основанные на вспомогательных функциях, определенных на произведении пространств.

**Постановка задачи.** Рассмотрим уравнения возмущенного движения механической системы с неточными значениями параметров

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= f(t, x_t, \alpha), & t \neq \tau_k, \\ \Delta x &= I_k(t, x(t^-)), & t = \tau_k, \quad k \in \mathbb{N}_+, \end{aligned} \tag{1}$$

где  $x \in \mathbb{R}^n$ ,  $x_t \in PC([- \tau, 0], \mathbb{R}^n)$ ,  $f: \mathbb{R}_+ \times PC \times \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R}^n$ ;  $PC = PC([- \tau, 0], \mathbb{R}^n)$  — пространство кусочно-непрерывных справа функций  $\varphi: [- \tau, 0] \rightarrow \mathbb{R}^n$ ;  $I_k: \mathbb{R}_+ \times S(H) \rightarrow \mathbb{R}^n$ ,  $S(H) = \{x \in \mathbb{R}^n, \|x\| < H\}$ ;  $\Delta x = x(t) - x(t^-)$ ;  $t_0 < \tau_k < \tau_{k+1}$ ,  $\tau_k \rightarrow +\infty$  при  $k \rightarrow +\infty$ ,  $k \in \mathbb{N}_+$ ;  $\alpha \in \mathcal{G}$  — параметр неточности системы (1),  $\mathcal{G} \subseteq \mathbb{R}^d$ ,  $d \geq 1$ ;  $\mathbb{N}_+$  — множество всех положительных чисел.

Пусть  $|\varphi| = \sup_{-\tau \leq s \leq 0} \|\varphi(s)\|$ , где  $\|\cdot\|$  — евклидова норма вектора в  $\mathbb{R}^n$  и  $x_t(s) = x(t+s)$  при  $-\tau \leq s \leq 0$ ;  $dx/dt$  обозначает правую производную вектора состояния системы  $x(t)$ .

Пусть  $\sigma \geq t_0$  и

$$x(\sigma) = \varphi(s) \in PC([- \tau, 0), \mathbb{R}^n), \quad \sigma \geq t_0. \quad (2)$$

Движение системы (1) корректно определено при начальном состоянии (2), если вектор-функция  $x(t): [\sigma - \tau, \beta) \rightarrow \mathbb{R}^n$  для некоторого значения  $\beta$  ( $0 < \beta \leq +\infty$ ) непрерывна при  $t \in [\sigma - \tau, \beta) \setminus \{\tau_k, k = 1, 2, \dots\}$ , ее значения  $x(\tau_k^+)$ ,  $x(\tau_k^-)$  существуют, выполняется соотношение  $x(\tau_k^+) = x(\tau_k^-)$  для любого  $\tau_k \in [\sigma - \tau, \beta)$  и  $x(t)$  удовлетворяет системе уравнений (1) при любом  $\alpha \in \mathcal{G}$ .

Будем предполагать, что порядок системы (1) при любом  $\alpha \in \mathcal{G}$  остается неизменным, и состояние равновесия  $x = 0$  для системы (1) является единственным, т.е.  $f(t, 0, \alpha) = I_k(t, 0) = 0$ ,  $k = 1, 2, \dots$ , при всех  $t \geq t_0$  и любых  $\alpha \in \mathcal{G}$ .

Условия, при которых для заданных начальных функций (2) существует единственное решение  $x(t, \alpha) = x(t, \sigma, \varphi, \alpha)$ , имеют вид (см. [2]):

$H_1$ ) вектор-функция  $f$  непрерывна на  $[\tau_{k-1}, \tau_k] \times PC \times \mathcal{G}$  при любом  $k \in \mathbb{N}_+$  и  $\varphi \in PC(\rho^*) = \{\varphi \in PC : |\varphi| < \rho^*, \rho^* > 0\}$  и  $\lim_{(t, \varphi) \rightarrow (\tau_k^-, \varphi)} f(t, \varphi, \alpha) = f(\tau_k^-, \varphi, \alpha)$  существует

при любом  $\alpha \in \mathcal{G}$ ;

$H_2$ ) вектор-функция  $f$  является локально липшицевой по  $\varphi$  для любого компактного множества в  $PC(\rho^*)$  при любом значении  $\alpha \in \mathcal{G}$ ;

$H_3$ ) для любого  $k \in \mathbb{N}_+$   $I_k(t, x) \in C(\mathbb{R}_+ \times S(H), \mathbb{R}^n)$ ;

$H_4$ ) существует величина  $H_1 > 0$  ( $H_1 \leq H$ ) такая, что при  $x \in S(H_1)$  вектор  $x + I_k(\tau_k, x) \in S(H)$  при всех  $k \in \mathbb{N}_+$ .

Далее, для краткости, решение  $x(t, \sigma, \varphi, \alpha)$  будем обозначать  $x(t, \alpha)$ .

**Определение 1.** Состояние равновесия  $x = 0$  системы (1)

а) устойчиво, если для любых  $\sigma \geq t_0$  и  $\varepsilon > 0$  существует  $\delta = \delta(\varepsilon, \sigma) > 0$  такое, что при  $\varphi \in PC(\delta)$  при всех  $t \geq \sigma$  имеет место оценка  $\|x(t, \alpha)\| \leq \varepsilon$  при любых  $\alpha \in \mathcal{G}$ ;

б) равномерно устойчиво, если величина  $\delta$  в определении а не зависит от  $\sigma$ ;

в) асимптотически устойчиво, если оно устойчиво и существует  $\delta_0 = \delta_0(\varepsilon)$  такое, что при  $\varphi \in PC(\delta_0)$  верно соотношение  $\lim_{t \rightarrow \infty} \|x(t, \alpha)\| = 0$  при  $t \rightarrow \infty$ .

Укажем условия, при которых нулевое решение системы (1) обладает определенным типом устойчивости или неустойчивости в смысле приведенных определений.

**Матричнозначная функция на произведении пространств.** Для системы (1) будем рассматривать функцию

$$U(t, *) = [v_{ij}(t, *)], \quad i, j = 1, 2, \quad (3)$$

на произведении пространств  $\mathbb{R}^n$  и  $PC(H)$ . Предположим, что элементы  $v_{ij}(t, *)$  удовлетворяют таким условиям.

*Условие  $B_1$ :* функционал  $v_{11}(t, \varphi): \mathbb{R}_+ \times PC(H) \rightarrow \mathbb{R}_+$  определен при всех  $t \geq t_0$  и, кроме того,

а)  $v_{11}(t, x)$  — непрерывен на  $[\tau_{k-1}, \tau_k) \times PC(H)$  при  $\varphi \in PC(H)$ ,  $k \in \mathbb{N}_+$ , и существует предел

$$\lim_{(t, y) \rightarrow (\tau_k^-, \varphi)} v_{11}(t, y) = v_{11}(\tau_k^-, \varphi);$$

б) функционал  $v_{11}(t, \varphi)$  — локально липшицев по  $\varphi$  на любом компактном множестве в  $PC(H)$  и  $v_{11}(t, 0) = 0$  при всех  $t \geq t_0$ .



Условие  $B_2$ : функция  $v_{22}(t, x): \mathbb{R}_+ \times S(H^*) \rightarrow \mathbb{R}_+$  определена при всех  $t \geq t_0$  и, кроме того,

а) функция  $v_{22}(t, x)$  непрерывна на  $[\tau_{k-1}, \tau_k) \times S(H^*)$  при каждом  $k \in \mathbb{N}$  и при всех  $x \in S(H^*)$  и  $k \in \mathbb{N}$  существует предел

$$\lim_{(t,u) \rightarrow (\tau_k^-, \psi)} v_{22}(t, u) = v_{22}(\tau_k^-, \psi);$$

б) функция  $v_{22}(t, x)$  локально липшицева по  $x \in S(H^*)$  и  $v_{22}(t, 0) = 0$  при всех  $t \geq t_0$ .

Условие  $B_3$ : элемент  $v_{12}(t, \varphi, x) = v_{21}(t, \varphi, x)$  и  $v_{12}(t, \varphi, x): \mathbb{R}_+ \times PC(H) \times S(H^*) \rightarrow \mathbb{R}$  является корректирующим, определен на произведении пространств  $\mathbb{R}^n \times PC(H)$  и удовлетворяет условиям  $B_1, B_2$  по переменным  $\varphi, x$  соответственно.

При помощи вектора  $\theta \in \mathbb{R}_+^2$  построим функцию [3]

$$V(t, \varphi, x) = \theta^T U(t, *) \theta \tag{4}$$

и будем применять ее вместе с полной производной

$$D^+V(t, \varphi, x) = \theta^T D^+U(t, *) \theta \tag{5}$$

вдоль решений системы (1). Здесь

$$D^+U(t, x, \varphi) = \limsup\{[U(t+h, x_{t+h}(t, \varphi), \varphi(0) + hf(t, \varphi, \alpha)) - U(t, x, \varphi)]h^{-1} : h \rightarrow 0^+\}$$

вычисляется поэлементно.

Функция (4), разрешающая вместе с производной (5) проблему устойчивости состояния  $x = 0$  системы (1), называется функцией Ляпунова, заданной на произведении пространств  $\mathbb{R}^n$  и  $PC(H)$ .

Заметим, что если в матрице (4)  $v_{ij}(t, \varphi, x) = 0$  при  $i \neq j, i, j = 1, 2$ , тогда функция  $V(t, \varphi, x)$  имеет вид

$$V_0(t, \varphi, x) = \theta_1^2 v_{11}(t, \varphi) + \theta_2^2 v_{22}(t, x), \quad \theta_i \in \mathbb{R}_+.$$

Далее будем обозначать  $V_1(t, \varphi) = \theta_1^2 v_{11}(t, \varphi)$  и  $V_2(t, x) = \theta_2^2 v_{22}(t, x)$ .

Функционал  $V_1(t, \varphi): \mathbb{R}_+ \times PC(H) \rightarrow \mathbb{R}_+$  принадлежит классу  $B_0$ , если  $\theta_1^2 v_{11}(t, \varphi)$  удовлетворяет условию  $B_1$  и для любого  $\varphi \in PC([\sigma - \tau, \infty), \mathbb{R}^n)$  функционал  $V_1(t, \varphi)$  непрерывен при всех  $t \geq \sigma$ .

Заметим, что функционал  $V_1(t, \varphi)$  вида

$$V_1(t, \varphi) = \int_{-\tau}^0 b(s+t) \|\varphi(s)\|^\gamma ds, \quad \gamma \geq 1$$

принадлежит классу  $B_0$ , если  $b(u) \in PC([\sigma - \tau, \infty), \mathbb{R}_+)$  и существует постоянная  $m > 0$  такая, что  $\int_{t-\tau}^t b(s) ds \leq m$  при всех  $t \geq \sigma$  (см. [4]).

Далее применяются некоторые классы функций сравнения при получении достаточных условий устойчивости движения системы (1). А именно,

$$K = \{w \in C(\mathbb{R}_+, \mathbb{R}_+): \text{ строго возрастающие и } w(0) = 0\};$$

$$Q = \{\psi \in C(\mathbb{R}_+, \mathbb{R}_+): \psi(0) = 0, \psi(s) > 0 \text{ при } s > 0\};$$

$$Q^* = \{\psi \in C(\mathbb{R}_+, \mathbb{R}_+): \text{неубывающие, } \psi(0) = 0, \psi(s) \geq s \text{ при } s > 0\}.$$

**Достаточные условия устойчивости.** Установим условия робастной устойчивости состояния  $x = 0$  системы (1) на основе функции (3) при некоторых дополнительных условиях.

**Теорема 1.** *Предположим, что для системы (1) построена функция (3), в которой элементы  $v_{ij}(t, \varphi, x) = 0$  при  $i \neq j$  и существуют функции сравнения  $\bar{w}_1, \bar{w}_2, \bar{w}_3 \in K$ -классу и  $\bar{\psi} \in Q$ -классу такие, что для функции  $V_0(t, x, \varphi) = V_1(t, \varphi) + V_2(t, x)$  верны оценки*

1)  $\bar{w}_1^T(\|\varphi(0)\|)A_1\bar{w}_1(\|\varphi(0)\|) \leq V_0(t, x, \varphi) \leq \bar{w}_2^T(|\varphi|)A_2\bar{w}_2(|\varphi|)$ , где  $A_1, A_2$  —  $2 \times 2$ -симметрические постоянные матрицы;  $V_1 \in B_0$ -классу и  $V_2$  удовлетворяет условию  $B_2$ ;

2) для любого вектора  $x \in S(H^*)$  при  $t = \tau_k$  верны оценки

$$V_2(\tau_k, x + I_k(\tau_k, x)) - V_2(\tau_k^-, x) \leq -\bar{\psi}^T(V(\tau_k^-, x, \varphi))B_k\bar{\psi}(V_2(\tau_k^-, x, \varphi)) \text{ при всех } k \in \mathbb{N},$$

где  $B_k$  —  $2 \times 2$ -постоянные симметрические матрицы, для которых  $\lambda_M^k(B_k) \geq 0$  и  $\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_m^k(B_k) = \infty$ ,  $\lambda_m^k(B_k)$  — максимальное собственное значение матрицы  $B_k$ ,  $k \in \mathbb{N}_+$ ;

3) при любом значении  $\alpha \in \mathcal{G}$  для решений  $x(t, \alpha)$  системы (1) в области значений  $x \in S(H^*)$  выполняется оценка

$$D^+V_0(t, x, \varphi)|_{(1)} \leq \bar{w}_3^T(|x_t|)A_3\bar{w}_3(|x_t|),$$

где  $A_3$  —  $2 \times 2$ -постоянная симметрическая матрица;

4) для любого момента  $\sigma \geq t_0$  и числа  $\eta > 0$  существует  $\beta > 0$  такое, что из условия  $V_0(t, x, \varphi) \geq \eta$  при  $t \geq \sigma$  следует  $V_2(t, x) > \beta$  при  $t \geq \sigma$ .

Тогда, если выполняются условия 1–3 и

а) матрицы  $A_1, A_2$  положительно определены и  $\lambda_M(A_3) \leq 0$ , то состояние равновесия  $x = 0$  системы (1) равномерно устойчиво;

б) выполняются условия 1–4 теоремы 1 и условие (а), то состояние  $x = 0$  системы (1) равномерно асимптотически устойчиво.

**Доказательство.** Преобразуем оценку для функции  $V_0(t, x, \varphi)$  из условия 1 теоремы 1 к виду

$$\lambda_m(A_1)w_1(\|\varphi(0)\|) \leq V_0(t, x, \varphi) \leq \lambda_M(A_2)w_2(|\varphi|), \quad (6)$$

где  $\lambda_m(A_1)$  — минимальное собственное значение матрицы  $A_1$  и  $\lambda_M(A_2)$  — максимальное собственное значение матрицы  $A_2$ ,  $w_1, w_2 \in K$ -классу и такие, что

$$w_1(\|\varphi(0)\|) \leq \bar{w}_1^T(\|\varphi(0)\|)\bar{w}_1(\|\varphi(0)\|) \quad \text{и} \quad w_2(|\varphi|) \geq \bar{w}_2^T(|\varphi|)\bar{w}_2(|\varphi|).$$

Пусть задано  $0 < \varepsilon \leq H^*$ . Для заданного  $\varepsilon$  выберем  $\delta = \delta(\varepsilon) > 0$  так, чтобы выполнялось неравенство

$$\lambda_M(A_2)w_2(\delta) < \lambda_m(A_1)w_1(\varepsilon).$$

Рассмотрим решение  $x(t, \alpha) = x(t, \sigma, \varphi, \alpha)$  системы (1) с начальным условием  $\varphi \in PC(\delta)$  при  $\sigma \geq t_0$ . Покажем, что при выполнении условий 1–3 теоремы 1 верна оценка  $\|x(t, \alpha)\| < \varepsilon$  при всех  $t \geq \sigma$  и при всех  $\alpha \in \mathcal{G}$ .

Условие 3 теоремы 1 выполняется, если

$$D^+V_0(t, x, \varphi) \leq \lambda_M(A_3)w_3(|\varphi|), \quad (7)$$

где  $\lambda_M(A_3) \leq 0$  — максимальное собственное значение матрицы  $A_3$  при всех  $\alpha \in \mathcal{G}$  и  $w_3(|\varphi|) \geq \bar{w}_3^T(|\varphi|)A_3\bar{w}_3(|\varphi|)$ , где  $w_3 \in W$ -классу.

Из условия (7) следует, что

$$D^+V_0(t, x, \varphi)|_{(1)} \leq 0 \quad \text{при} \quad \sigma \leq \tau_{k-1} \leq t < \tau_k$$

и при всех  $k \in \mathbb{N}$ . Следовательно, функция  $V_0(t) = V_0(t, x_t, \varphi(t))$  не возрастает на интервалах  $[\tau_{k-1}, \tau_k)$ . Из условия 2 теоремы 1 следует оценка функции  $V_0(t)$  для значений  $t = \tau_k$ :

$$V_0(\tau_k) - V_0(\tau_k^-) = V_2(\tau_k, x(\tau_k) + I_k(\tau_k, x(\tau_k^-))) - V_2(\tau_k, x(\tau_k^-)) \leq -\lambda_m^k(B_k)\psi(V_0),$$

где  $\psi(r) \geq \bar{\psi}^T(r)\bar{\psi}(r)$ . Поэтому функция  $V_0(t)$  не возрастает на интервале  $[\sigma, \infty)$  и это приводит к неравенствам

$$\lambda_m(A_1)w_1(\|x(t, \alpha)\|) \leq V_0(t) \leq V_0(\sigma) \leq \lambda_M(A_2)w_2(\delta) < \lambda_m(A_1)w_1(\varepsilon), \quad t \geq \sigma.$$

Отсюда следует, что  $\|x(t, \alpha)\| < \varepsilon$  при всех  $t \geq \sigma$  и любых  $\alpha \in \mathcal{G}$  как только  $\varphi \in PC(\delta)$ . Этим доказана равномерная устойчивость состояния  $x = 0$  гибридной системы (1).

Далее покажем, что состояние  $x = 0$  системы (1) асимптотически устойчиво, т.е.  $\lim_{t \rightarrow \infty} \|x(t, \alpha)\| = 0$  при всех  $\alpha \in \mathcal{G}$ . Обозначим  $\eta = \lim V_0(t, x_t)$  при  $t \rightarrow \infty$ . Пусть  $\eta > 0$ . Тогда, согласно условию 4 теоремы 1, существует  $\beta > 0$  такое, что  $V_2(t, x) \geq \beta$  при всех  $t \geq \sigma$ .

Вычислим величину

$$K = \inf_{\beta \leq V_2 \leq \lambda_M(A_2)w_2(\delta)} [\psi(V_2)] > 0.$$

Из условия (2) теоремы 1 следует, что

$$V_2(\tau_k) - V_2(\tau_k^-) \leq -\lambda_M^k(B_3)\psi(V_2(\tau_k^-)) < -K\lambda_m^k(B_3) \quad \text{при всех} \quad k \in \mathbb{N}_+.$$

Функция  $V_0(t)$  не возрастает при всех  $t \geq \sigma$  и при любых значениях  $\alpha \in \mathcal{G}$ , т.е.

$$V_0(\tau_k) - V_0(\tau_{k-1}) \leq V_0(\tau_k) - V_0(\tau_k^-) = V_2(\tau_k) - V_2(\tau_k^-) < -K\lambda_m^k(B_3).$$

Отсюда находим

$$V_0(\tau_k) \leq V_0(\tau_m) - K \sum_{i=m}^s \lambda_M^i(B_3) \rightarrow -\infty \quad \text{при} \quad s \rightarrow \infty.$$

Полученное противоречие доказывает, что величина  $\eta$  должна быть равна 0, т.е.  $\lim_{t \rightarrow +\infty} \|x(t, \alpha)\| = 0$  при  $t \rightarrow +\infty$ . Этим теорема 1 доказана.

Пример. Рассмотрим уравнение [4]

$$\frac{dx}{dt} = -a(t)x(t) + b(t)x(t - \tau), \quad t \neq \tau_k,$$

$$\Delta x(\tau_k) = I_k(x(\tau_k^-)), \quad k \in \mathbb{N}_+,$$

где  $a(t), b(t) \in C(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ ,  $a(t) \geq \bar{a} > 0$ ,  $|b(t)| \leq \bar{b}$ ,  $I_k(x) \in C(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ .

Если для этого уравнения выполняются условия:

1) существуют постоянные  $b_k \geq 0$ ,  $\sum_{k=1}^{\infty} b_k < +\infty$  такие, что  $|x + I_k(x)| \leq (1 + b_k)x^2$  при всех  $k \in \mathbb{N}_+$ ;

2) выполняется неравенство  $\bar{a} > \bar{b}\sqrt{\beta}$ , где  $\beta = \prod_{k=1}^{\infty} (1 + b_k)$ ;

3) существует  $q > 1$  такое, что  $\bar{a} - q\bar{b}\sqrt{\beta} > 0$ ,

тогда решение  $x = 0$  равномерно асимптотически устойчиво.

Далее установим условия неустойчивости состояния  $x = 0$  гибридной системы (1).

**Теорема 2.** *Предположим, что для системы (1) построена функция  $V_0(t, x, \varphi)$  и существуют функции сравнения  $\bar{w}_1, \bar{w}_2 \in W$ -классу,  $\psi \in Q$ -классу такие, что функция  $V_0(t, x, \varphi) = V_1(t, \varphi) + V_2(t, x)$  ограничена и для нее выполняются условия:*

1) *при любых  $x \in S(\rho)$  верна оценка*

$$\bar{w}_1^T(\|x\|)A_1\bar{w}_1(\|x\|) \leq V_2(t, x),$$

где  $A_1$  —  $2 \times 2$ -постоянная симметрическая матрица;

2) *существует хотя бы одно значение  $\alpha \in \mathcal{G}$ , при котором вдоль решения  $x(t, \alpha)$  системы (1) выполняется неравенство*

$$D^+V_0(t, x, \varphi)|_{(1)} \geq \bar{w}_2^T(|x_t|)A_3\bar{w}_2(|x_t|),$$

где  $A_3$  —  $2 \times 2$ -постоянная симметрическая матрица;

3) *для каждого значения  $k \in \mathbb{N}_+$  и  $x \in S(H^*)$  существует  $2 \times 2$ -матрица  $B_3^{(k)}$  такая, что*

$$V_2(t, x + I_k(\tau_k^-, x)) - V_2(\tau_k^-, x) \geq \bar{\psi}^T(V_2(\tau_k^-, x))B_3^{(k)}\bar{\psi}(V_2(\tau_k^-, x)),$$

где  $\lambda_m(B_3^{(k)}) \geq 0$ ,  $\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_m(B_3^{(k)}) = \infty$ ,  $\lambda_m(B_3^{(k)})$  — минимальное собственное значение матрицы  $B_3$  при  $k = 1, 2, \dots$ ;

4) *для любых  $\sigma \geq t_0$  и  $\eta > 0$  существует  $\beta > 0$  такое, что из условия  $V_0(t, x_t, \eta) \geq \eta$  при  $t \geq \sigma$  следует, что  $\|x(t, \alpha)\| \geq \beta$  при всех  $t \geq \sigma$  и при любых  $\alpha \in \mathcal{G}$ .*

Тогда, если матрицы  $A_1, A_3$  положительно определенные, то состояние  $x = 0$  системы (1) неустойчиво.

**Доказательство.** Пусть  $x(t, \alpha)$  — решение системы (1) при любом  $\alpha \in \mathcal{G}$  и при начальной функции  $\varphi \in PC(\delta)$ , где  $\delta > 0$  — сколь угодно малое число. Предположим, что при выполнении условий теоремы 3 решение  $x = 0$  устойчиво. Пусть  $\sigma \in [\tau_{m-1}, \tau_m)$  для некоторого  $m \in \mathbb{N}_+$ . Из условий (1)–(3) теоремы 3 следует, что:

а)  $\lambda_m(A_1)w(\|x\|) \leq V_2(t, x, \eta)$ ;

б)  $D^+V_0(t, x, \varphi)|_{(1)} \geq \lambda_m(A_3)w_2(|x_t|)$ ,

где  $\lambda_m(A_3)$  — минимальное собственное значение матрицы  $A_3$  и  $w_2(r) \leq \bar{w}_2^T(r)\bar{w}_2(r)$  при любом значении  $r \in [0, +\infty)$ ;

в)  $V_0(\tau_k) - V_0(\tau_k^-) = V_2(\tau_k) - V_2(\tau_k^-) \geq \lambda_m^k(B_3)\psi(V_2(\tau_k^-))$ , где  $\psi \in Q$ -классу и  $\psi(r) \leq \bar{\psi}^T(r)\bar{\psi}(r)$ .

Из условий б, в следует, что функция  $V_0(t, x, \varphi)$  не убывает на любом решении  $x(t, \alpha)$  на интервалах  $[\sigma, \tau_m)$  и  $[\tau_k, \tau_{k+1})$  при  $k \geq m$ . Так как  $V_0(\tau_k^-) \geq V_0(\tau_{k-1})$ , то

$$V_0(\tau_k) - V_0(\tau_{k-1}) \geq \lambda_m^k(B_3)\psi(V_2(\tau_k^-)). \quad (8)$$

Поэтому верна оценка  $V_0(t) \geq V_0(\sigma)$  при всех  $t \geq \sigma$ . Согласно условию  $a$  теоремы 3, имеем оценку  $V_2(\tau_k^-) \geq \lambda_m(A_1)w_1(\|x(\tau_k^-)\|) \geq \lambda_m(A_1)w_1(\beta)$ . Отсюда из (8) следует

$$V_0(\tau_k) - V_0(\tau_{k-1}) \geq \lambda_m^k(B_3)\psi(\lambda_m(A_1)w_1(\beta))$$

и далее

$$V_0(\tau_k) \geq V_0(\tau_m) + \psi(\lambda_m(A_1)w_1(\beta)) \sum_{j=m+1}^k \lambda_M^k(B_3) \rightarrow \infty \quad \text{при} \quad k \rightarrow \infty.$$

Это противоречит ограниченности функции  $V_0(t)$  при всех  $t \geq \sigma$ . Теорема 2 доказана.

**Заключительные замечания.** При построении функций  $V_1(t, \varphi)$  и  $V_2(t, x)$  могут быть применены некоторые известные результаты (см., например, [3] и др.). Применение матричнозначных функций (3) и функций вида  $V_0(t, \varphi, x) = V_1(t, \cdot) + V_2(t, \cdot)$ , заданных на произведении пространств  $PC(\delta) \times \mathbb{R}^n$ , позволяет расширить применение теорем прямого метода Ляпунова для импульсных систем (см. [6, 7] и библиографию там).

1. Wang Q. Stability and boundedness of impulsive systems with time delay. – Waterloo, Ontario, Canada: Univ. of Waterloo, 2007. – 204 p.
2. Shen J., Luo Z., Liu X. Impulsive stabilization of functional differential equations via Liapunov functionals // J. Math. Anal. Appl. – 1999. – **240**. – P. 1–5.
3. Martynyuk A. A. Stability of motion: the role of multicomponent Lyapunov's functions. – Cambridge: Cambridge Scientific Publishers, 2007. – 322 p.
4. Shen J. H. Razumikhin techniques in impulsive functional differential equations // Nonlinear Analysis. – 1999. – **36**. – P. 119–130.
5. Yan J., Shen J. Impulsive stabilization of functional differential equations dy Lyapunov–Razumikhin functions // Nonlinear Analysis. – 1999. – **37**. – P. 245–255.
6. Самойленко А. М., Перестюк Н. А. Дифференциальные уравнения с импульсным воздействием. – Киев: Вища шк., 1987. – 288 с.
7. Lakshmikantham V., Leela S., Martynyuk A. A. Stability analysis of nonlinear systems. – New York: Marcel Dekker, 1989. – 305 p.

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

Поступило в редакцию 21.12.2011

Академік НАН України **А. А. Мартинюк, Ю. А. Мартинюк-Чернієнко**

### Про робастну стійкість імпульсних систем із післядією

*Досліджується клас механічних систем, що описуються неточними рівняннями. А саме, розглядається система із післядією при імпульсних збуреннях. За допомогою методу функцій Ляпунова, означених на добутку просторів, встановлено умови робастної стійкості в термінах обмежень на спеціальні матриці.*

Academician of the NAS of Ukraine **A. A. Martynyuk,**  
**Yu. A. Martynyuk-Chernienko**

### On the robust stability of impulsive systems with delay

*We investigate a class of mechanical systems that are described by uncertain systems of equations. Namely, we consider the systems with delay under impulsive perturbations. By using the method of Lyapunov functions defined on a product of spaces, the robust stability criteria are established under fairly simple algebraic conditions.*

В. Л. Поляков

## К расчету коэффициента фильтрации суффозионных грунтов

*(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины А. Я. Олейником)*

*Разработаны формулы для расчета коэффициента фильтрации несвязного грунта до начала и после завершения процесса механической суффозии. Сопоставлены теоретические и экспериментальные значения указанных коэффициентов для модельных суффозионных грунтов. На многочисленных примерах иллюстрируется изменение проницаемости грунта в зависимости от концентрации и размеров суффозионных частиц.*

Большинство несвязных и некоторые связные грунты на Украине, в Белоруси являются суффозионными [1, 2]. Они включают структурную (скелет) и неструктурную (суффозионную) компоненты, которые имеют существенно различающиеся физико-механические свойства. В свою очередь, любая из этих компонент может состоять из нескольких фракций. Но если в принципе возможно введение пары эквивалентных диаметров —  $D$  (для крупных, структурных) и  $d$  (для более мелких, неструктурных частиц), то оправдано определять фильтрационные характеристики и, в первую очередь, коэффициент фильтрации пористой среды, исходя из раздельного учета механического воздействия указанных компонент на фильтрационный поток.

Очевидно, что соответствующие силы сопротивления пропорциональны скорости, как правило, ламинарного течения жидкости (фильтрации). Коэффициенты же пропорциональности ввиду исключительной сложности строения грунтов в каждом конкретном случае следует находить эмпирическим путем. Иногда, однако, удается избежать проведения трудоемких опытов, привлекая для этого уже имеющиеся экспериментальные наработки и их обобщения [3]. Наиболее удачной в этом отношении следует признать формулу Козени-Кармана, которая на протяжении нескольких десятилетий с успехом применяется для расчета гидравлических характеристик песчаных, несуффозионных грунтов; зернистых загрузок водоочистных фильтров. Содержание неструктурных частиц в природных пористых средах обычно сравнительно малое, что дает возможность распространить указанную формулу и на суффозионные грунты. Но прежде всего эта формула просто адаптируется для определения проницаемости  $K_{se}$  подобного грунта после полного завершения в нем деформаций (все суффозионные частицы вымыты)

$$K_{se} = \frac{(1 - m_s)^3 D^2}{180m_s^2}, \quad (1)$$

где  $m_s$  — объемная концентрация частиц скелета. Формула (1) после соответствующей корректировки может использоваться для нахождения проницаемости структурной компоненты двухкомпонентного двухфракционного грунта, а именно,

$$K_s = \frac{n^3 D^2}{180m_s^2(n + m_s)}, \quad (2)$$

где  $n = 1 - m_s - m$ ,  $n$  и  $m$  — текущие пористость грунта и объемная концентрация суффозионных частиц. Если теперь совокупность таких частиц формально рассматривать как специальную пористую среду, в которой неструктурные частицы будут играть роль структурных, то на базе традиционного представления порового пространства в виде пучка пор — капилляров для ее проницаемости  $K_c$  выводится следующее выражение:

$$K_c = \frac{n^3 d^2}{180 m^2 (n + m)}. \quad (3)$$

Сила сопротивления фильтрационному течению жидкости  $F_r$  в общем случае будет [4, 5]

$$F_r = \frac{\mu}{K} V, \quad (4)$$

где  $\mu$  — динамическая вязкость;  $V$  — скорость фильтрации;  $K$  — проницаемость среды. Тогда из равенства сил сопротивления со стороны выделенных неподвижных компонент фактической силе для исходного грунта вытекает связь между ее общей проницаемостью  $K_0$  и нововведенными проницаемостями  $K_{s0}$ ,  $K_{c0}$  в виде

$$\frac{1}{K_0} = \frac{1}{K_{s0}} + \frac{1}{K_{c0}}, \quad (5)$$

где  $K_{s0}$ ,  $K_{c0}$  — значения  $K_s$ ,  $K_c$  при  $m = m_0$ ;  $m_0$  — объемная концентрация суффозионных частиц в недеформированном грунте. И, следовательно, для проницаемости  $K_0$  с учетом выражений (2), (3) можно предложить следующую формулу:

$$K_0 = \frac{n_0^3 D^2}{180 m_s^2 (n_0 + m_s)} \left[ 1 + \left( \frac{m_0 D}{m_s d} \right)^2 \frac{n_0 + m_0}{n_0 + m_s} \right]^{-1}. \quad (6)$$

Согласно (1) и (6), максимальное относительное приращение коэффициента фильтрации  $k_e$  в результате предельного деформирования среды составит

$$\bar{k}_e = \frac{k_e}{k_0} = \frac{K_{se}}{K_0} = \frac{(n_0 + m_0)^3 (n_0 + m_s)}{n_0^3} \left[ 1 + \left( \frac{m_0 \bar{D}}{m_s} \right)^2 \frac{n_0 + m_0}{n_0 + m_s} \right], \quad (7)$$

где  $k_0$  — коэффициент фильтрации исходного грунта;  $\bar{D} = D/d$ .

Как известно [6], характерное время суффозионного процесса обычно намного меньше, чем фильтрационного. После завершения перераспределения и выноса из грунта неструктурных частиц почти во всей области деформаций остаются лишь частицы скелета. При этом коэффициент фильтрации (проницаемость) предельно деформированного грунта достигает максимального значения  $k_e$ . Превышение им исходного значения  $k_0$  дает представление о серьезности происшедших в грунте деформаций и о их возможных последствиях для водно-физической картины в целом. Вообще же аккуратное определение относительной величины  $\bar{k}_e$  способствует достоверному прогнозу действия дренажа в суффозионных грунтах, надежному обоснованию их параметров. В частном случае исчезающе малого содержания неструктурных частиц ( $m \rightarrow 0$ ) из (7) вытекает

$$\bar{k}_e \rightarrow n_0 + m_s = 1.$$

Формула (3) несколько занижает величину  $K_c$ , поскольку изначально завышается гидродинамическое взаимодействие указанных частиц. Верхнюю же границу интервала возможных значений  $K_c$  можно найти, пренебрегая подобным взаимодействием. Тогда суммарная сила сопротивления  $F_c$ , возникающая при обтекании совокупности суффозионных частиц со скоростью  $V/n$ , будет

$$F_c = \frac{3mC_w\rho_l}{4dn^2}V^2, \quad (8)$$

где  $C_w$  — коэффициент сопротивления;  $\rho_l$  — плотность жидкости. Так как даже вблизи таких сильных источников возмущения фильтрационного режима, какими являются дрены, течение обычно остается ламинарным, то для оценки коэффициента  $C_w$  можно воспользоваться известным точным выражением

$$C_w = \frac{24}{Re} = \frac{24n\nu}{Vd}, \quad (9)$$

где  $\nu$  — кинематическая вязкость. С учетом (9) сила  $F_c$  станет

$$F_c = \frac{18\nu m\rho_l}{nd^2}V. \quad (10)$$

Если теперь приравнять силы  $F_c$  и  $F_r$  (при  $K = K_c$ ), то для  $K_c$  справедлива формула

$$K_c = \frac{18m}{nd^2}. \quad (11)$$

Ее, кстати, несложно уточнить, приняв во внимание вышеупомянутое взаимодействие. Тогда достаточно ввести в формулу корректив, зависящий от  $m$  и  $d$ . После подстановки в (5) выражений (2), (11) и несложных преобразований с учетом  $n = n_0$ ,  $m = m_0$  получаем

$$K_0 = \frac{n_0^3 D^2}{180m_s^2(n_0 + m_s)} \left[ 1 + \frac{0,1m_0}{n_0 + m_s} (n_0 \bar{D})^2 \right]^{-1}. \quad (12)$$

Следовательно, относительная величина  $\bar{k}_e$  в таком случае с учетом (1) и (12) будет

$$\bar{k}_e = \frac{(n_0 + m_0)^3 (n_0 + m_s)}{n_0^3} \left[ 1 + \frac{0,1m_0}{n_0 + m_s} (n_0 \bar{D})^2 \right]. \quad (13)$$

При развитии в несвязном грунте механической суффозии удобно в фильтрационных расчетах вместо общепринятых проницаемости и коэффициента фильтрации (для неподвижной твердой фазы) использовать их эффективные значения  $K_{эф}$ ,  $k_{эф}$ . С помощью последних удастся дополнительно учитывать воздействие на фильтрационное течение подвижной неструктурной компоненты, оставаясь при этом в рамках традиционного представления для уравнения движения. Приняв во внимание, что разница между скоростями жидкости и частиц равна  $u_k$ , и разделив общую силу сопротивления на две составляющие (со стороны скелета и суффозионной компоненты), можно записать [7]

$$\frac{nu}{K_{эф}} = \frac{nu}{K_s} + \frac{nu_k}{K_c} = \frac{g}{\nu} \frac{\partial h}{\partial r}, \quad (14)$$



где  $\nu$  — кинематическая вязкость;  $h$  — пьезометрический напор. Из (14) вытекает, что

$$K_{\text{эф}} = \frac{\bar{u}K_sK_c}{K_s + \bar{u}K_c}. \quad (15)$$

Подстановка выражений для  $K_s$ ,  $K_c$  (2), (3) в (15) после несложных преобразований дает

$$K_{\text{эф}} = \frac{n^3D^2}{180m_s^2(n + m_s)} \left[ 1 + \frac{1}{\bar{u}} \left( \frac{m}{m_s} \bar{D} \right)^2 \frac{n + m}{n + m_s} \right]^{-1}. \quad (16)$$

Очевидно, что при отсутствии суффозионных частиц ( $m = 0$ )  $K_{\text{эф}} = K_{s0} = K_0$ . Если же суффозионные частицы ассоциированы с жидкостью ( $u_k = 0$ ), то  $\bar{u} \rightarrow \infty$  и  $K_{\text{эф}} = K_s$ . Наконец, при равенстве скорости частицы  $u_k$  будет  $\bar{u} = 1$  и  $K_{\text{эф}} = K_sK_c/(K_s + K_c)$ . Следует заметить, что при  $\bar{u} > 1$  (условие соблюдается везде внутри области деформаций)  $K_{\text{эф}} > K_0$ .

Явление фактически скачкообразного увеличения проницаемости несвязной пористой среды вначале ее деформирования можно трактовать как кризис сопротивления.

Сравнение формул (7) и (13) на примерах с типичными значениями  $m_0$ ,  $n_0$ ,  $d$  показало, что несмотря на существенную разницу в трактовке гидродинамического действия суффозионной компоненты, значения  $K_c$  отличались незначительно (на десятки процентов). А поскольку основной вклад в общую силу сопротивления дает именно скелет грунта, то достаточно ограничиться ориентировочными значениями  $K_c$ . В дальнейшем предпочтение было отдано формулам (3), (7), что, впрочем, не принципиально. Непосредственно об оправданности их использования в инженерных расчетах фильтрационного процесса в дренируемых суффозионных грунтах свидетельствует сопоставление теоретических и экспериментальных значений проницаемости после окончания деформаций. Привлекались опытные данные из работы [8], полученные для модельных суффозионных грунтов в секторном лотке. Серии экспериментов проводились с грунтами, сложенными благодаря тщательной калибровке из крупных частиц примерно одного размера ( $D = 0,387$  или  $0,465$  мм) и отсортированных мелких частиц ( $d = 0,13; 0,18$  или  $0,26$  мм). При этом пористость такой смеси менялась в незначительных пределах (от  $0,348$  до  $0,384$ ). Концентрация неструктурных частиц составила по массе 10% от концентрации структурных. Вода в надлежащим образом подготовленный грунт подавалась из дрены под повышенным напором, что обеспечило интенсивную мобилизацию и оттеснение суффозионных частиц к внешней границе фильтрующего массива.

Судя по результатам множества измерений напора в ближней к дрене и дальней зонах, подавляющая часть указанных частиц вообще выносилась из исследуемого грунта. Тем не менее, для сопоставительного анализа выбирались значения коэффициента фильтрации зоны, в которой гидродинамическая сила была наибольшей. Уместно заметить, что благодаря малой начальной концентрации суффозионных частиц даже их полное удаление не приводило к изменениям структуры среды. Для каждого набора исходных данных ( $D$ ,  $d$ ,  $n_0$ ) опыты выполнялись трижды. По трем эмпирическим значениям  $\bar{k}_e$  здесь вычислялось среднее значение этого коэффициента. Таким образом, в итоге были найдены четыре значения  $\bar{k}_e$  (отвечали значениям  $\bar{D} = 2,755; 2,584; 1,988; 1,789$ ), которые нанесены крестиками на рис. 1. Кроме того, рассчитаны кривые зависимости  $\bar{k}_e(\bar{D}^{-1})$  по формулам (7) и (13) при  $m_0 = 0,1m_s$ , также представленные на рис. 1, откуда видно, что экспериментальные точки расположены близко к обоим расчетным графикам. Этот факт подтверждает правомерность применения обеих формул для  $\bar{k}_e$  в фильтрационных расчетах, хотя несколько

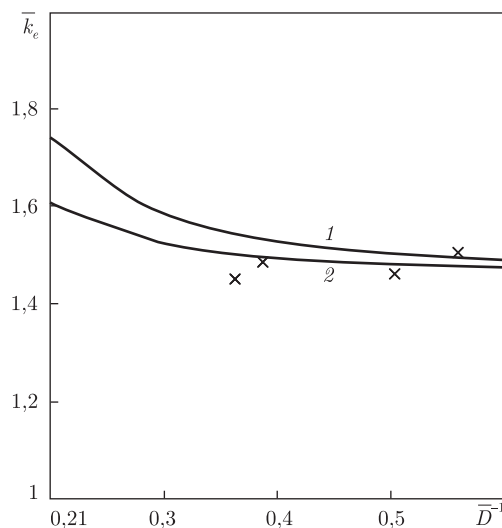


Рис. 1. Графики зависимости  $\bar{k}_e(\bar{D}^{-1})$ : 1 — по формуле (13); 2 — по формуле (7); — — теория; + — эксперимент

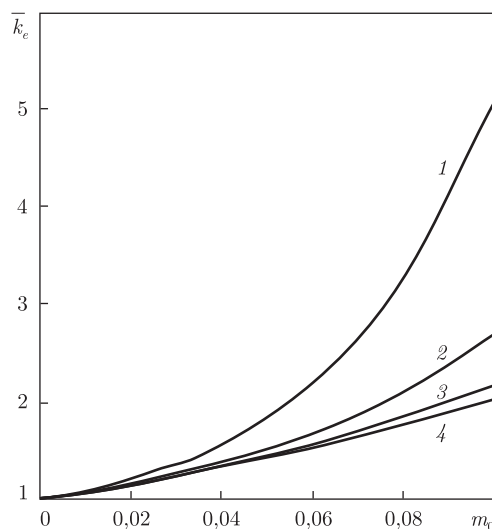


Рис. 2. Графики зависимости  $\bar{k}_e(m_0)$ : 1 —  $\bar{d} = 0,1$ ; 2 —  $\bar{d} = 0,2$ ; 3 —  $\bar{d} = 0,3$ ; 4 —  $\bar{d} = 0,5$

предпочтительнее выглядят результаты, полученные с помощью формулы (7). Поэтому последующие расчеты проводились именно на базе этой формулы.

Очевидно, что сопротивление фильтрационному потоку тем больше, чем больше суммарная поверхность неструктурных частиц. Ее площадь тесно связана с диаметром и количеством частиц. В связи с этим представляет интерес зависимость коэффициента  $\bar{k}_e$  от концентрации  $m_0$  и отношения  $\bar{D}$ . Семейства кривых  $\bar{k}_e(m_0)$ ,  $\bar{k}_e(\bar{D}^{-1})$  были рассчитаны при значениях  $m_0$  и  $\bar{D}$ , менявшихся непрерывно или дискретно в широких пределах, и показаны на рис. 2, 3. Из рис. 2 следует, что повышенное содержание суффозионных частиц может стать причиной, во-первых, сравнительно низкой проницаемости недеформированного грунта, во-вторых, резкого ее увеличения при эксплуатации дренажа, инициирующего механическую суффозию. Аналогичные последствия будет иметь и гипотетическое увеличе-

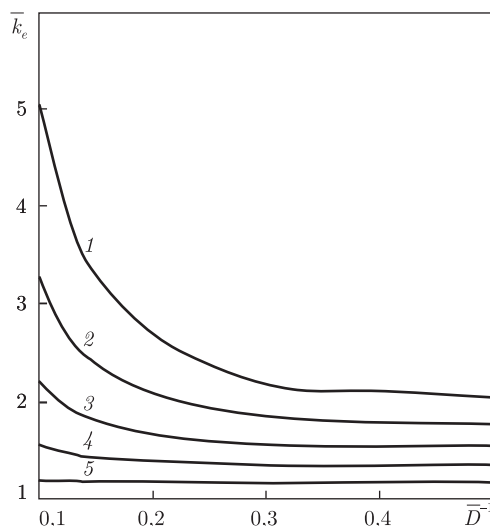


Рис. 3. Графики зависимости  $\bar{k}_e(\bar{D}^{-1})$ : 1 –  $m_c = 0,1$ ; 2 –  $m_c = 0,08$ ; 3 –  $m_c = 0,06$ ; 4 –  $m_c = 0,04$ ; 5 –  $m_c = 0,02$

ние размеров неструктурных частиц. Наибольшую чувствительность величина  $\bar{k}_e$  демонстрирует по отношению к концентрации  $m_0$  при больших ее значениях, а по отношению к  $\bar{D}$ , наоборот, при малых ( $d \ll D$ ).

Итак, в результате удаления всех суффозионных частиц коэффициент фильтрации грунта может возрасти на десятки процентов, а в отдельных случаях даже в несколько раз. Благодаря этому механическая суффозия, несмотря на локальный характер деформаций, способна оказывать значимое влияние на фильтрационный режим всего дренируемого грунта. Рекомендованные для расчета коэффициентов фильтрации суффозионных грунтов формулы можно считать практически равноценными. Однако для окончательного выбора расчетной формулы все-таки необходимо проведение экспериментов с модельными суффозионными грунтами, неструктурная компонента которых сложена из особо мелких частиц.

1. Пивовар Н. Г., Бугай Н. Г., Фридрихсон В. Л. и др. Дренаж с волокнистыми фильтрами для защиты территорий от подтопления. – Киев: Изд. Ин-та гидромех. НАН Украины, 2000. – 332 с.
2. Мурашко А. И., Сапожников Е. Г. Защита дренажа от заиления. – Минск: Ураджай, 1978. – 168 с.
3. Yucovic M., Soro A. Determination of hydraulic conductivity of porous media from grain-size composition. – Littleton, Colorado: Water Res. Publ., 1992. – 69 p.
4. Полубаринова-Кочина П. Я. Теория движения грунтовых вод. – Москва: Наука, 1977. – 664 с.
5. Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917–1967). – Москва: Наука, 1969. – 545 с.
6. Сидор В. Б. Порівняльний аналіз значущості суфозійного та фільтраційного процесів при функціонуванні різних типів дренажів // Пробл. водопостачання, водовідведення та гідраліки. – 2005. – Вип. 5. – С. 120–128.
7. Поляков В. Л. К вопросу о фильтрационных деформациях в несвязных грунтах // Доп. НАН України. – 2003. – № 3. – С. 47–52.
8. Дмитриев А. Ф., Хлапук Н. Н., Дмитриев Д. А. Деформационные процессы в несвязных грунтах в придренной зоне и их влияние на работу осушительно-увлажнительных систем. – Ровно: Изд-во РГТУ, 2002. – 145 с.

**В. Л. Поляков**

### **До розрахунку коефіцієнта фільтрації суфозійних ґрунтів**

*Розроблено формули для розрахунку коефіцієнта фільтрації незв'язного ґрунту до початку і після завершення процесу механічної суфозії. Зіставлено теоретичні і експериментальні значення вказаних коефіцієнтів для модельних суфозійних ґрунтів. Багаточисленні приклади ілюструють зміну проникності ґрунту залежно від концентрації і розмірів суфозійних частинок.*

**V. L. Polyakov**

### **On the calculation of the non-cohesion soil hydraulic conductivity**

*Formulae have been developed for calculating the hydraulic conductivity of non-cohesion soils before the onset and after the completion of the mechanical suffosion. A good correspondence has been established between theoretical and experimental data on the conductivity for model soils. Changes in the soil permeability depending on the concentration and the size of nonstructural particles have been illustrated by numerous examples.*

Академик НАН Украины **В. П. Шевченко, Е. В. Алтухов,  
М. В. Фоменко**

## Деформация трехслойных пластин со скользящей заделкой торцов и несовершенным контактом слоев

*В трехмерной постановке рассмотрена задача упругого равновесия трехслойной изотропной пластины симметричного строения. На лицевых плоскостях пластины выполняются условия плоского торца, а на границе раздела слоев имеет место скользящий контакт. Получены однородные решения уравнений равновесия в перемещениях в виде суммы бигармонического, вихревого и потенциального состояний. Выполнены аналитические и численные исследования трансцендентных уравнений для нахождения собственных значений. Исследован характер проявления краевого эффекта.*

Анализ теорий поперечно-неоднородных упругих пластин и методов решения конкретных задач отражен в работах [1–5]. В них отмечается актуальность развития аналитических методов исследования напряженно-деформированного состояния слоистых конструкций на основе уравнений пространственной теории упругости. Для трехслойных пластин важную роль сыграли однородные решения [5–9], предложенные А. И. Лурье [10]. В работе [7] рассмотрен случай идеального контакта слоев пластины.

В данной работе получены и исследованы однородные решения уравнений упругого равновесия трехслойной пластины при скользящей заделке торцов и неидеальном контакте слоев.

**Постановка задачи.** Рассмотрим трехслойную пластину симметричного строения относительно ее срединной плоскости со слоями из изотропных материалов и находящимися друг с другом в условиях скользящего контакта. На лицевых гранях пластины имеют место смешанные граничные условия типа плоского торца. На боковой поверхности действуют внешние усилия.

Построение однородных решений задачи об упругом равновесии рассматриваемой пластины сводится к интегрированию известных уравнений [4] для каждого слоя

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda^2} \partial_3^2 u_{mj} + D^2 u_{mj} + \nu_{m0} \partial_j \theta_m &= 0 \quad (j = 1, 2), \\ \frac{1}{\lambda^2} \partial_3^2 u_{m3} + D^2 u_{m3} + \frac{1}{\lambda} \nu_{m0} \partial_3 \theta_m &= 0 \end{aligned} \quad (1)$$

с учетом граничных условий

$$\begin{aligned} \sigma_{1j3}(x_1, x_2, \pm 1) &= 0, \quad u_{13}(x_1, x_2, \pm 1) = 0, \\ u_{13}(x_1, x_2, \pm \lambda_2) &= u_{23}(x_1, x_2, \pm \lambda_2), \quad \sigma_{133}(x_1, x_2, \pm \lambda_2) = \sigma_{233}(x_1, x_2, \pm \lambda_2), \\ \sigma_{1j3}(x_1, x_2, \pm \lambda_2) &= 0, \quad \sigma_{2j3}(x_1, x_2, \pm \lambda_2) = 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где

$$\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad D^2 = \partial_1^2 + \partial_2^2, \quad \theta_m = \partial_1 u_{m1} + \partial_2 u_{m2} + \lambda^{-1} \partial_3 u_{m3}, \quad \nu_{m0} = \frac{1}{1 - 2\nu_m}.$$

Другие обозначения здесь и ниже соответствуют принятым в работе [7].

**Построение однородных решений.** Однородные решения задачи (1), (2) для симметричной (обозначаемой значком “+” сверху) и кососимметричной (обозначаемой значком “-”) деформаций можно представить в виде суммы вихревого, потенциального и бигармонического состояний:

$$u_{mi}^{\pm}(x_1, x_2, x_3) = u_{miV}^{\pm}(x_1, x_2, x_3) + u_{miP}^{\pm}(x_1, x_2, x_3) + u_{miB}^{\pm}(x_1, x_2, x_3) \quad (i = \overline{1, 3}; m = 1, 2).$$

Перемещения вихревого состояния имеют вид

$$u_{m1V}^{\pm}(x_1, x_2, x_3) = \sum_{k=1}^{\infty} p_{mk}^{\pm}(x_3) \partial_2 B_k^{\pm}(x_1, x_2),$$

$$u_{m2V}^{\pm}(x_1, x_2, x_3) = - \sum_{k=1}^{\infty} p_{mk}^{\pm}(x_3) \partial_1 B_k^{\pm}(x_1, x_2), \quad u_{m3V}^{\pm} = 0.$$

Здесь

$$p_{1k}^{\pm}(x_3) = \cos \delta_k^{\pm}(x_3 - \lambda_2), \quad p_{2k}^{\pm}(x_3) = 0, \quad \text{когда} \quad \delta_k^{\pm} \lambda_1 = \pi k;$$

$$p_{1k}^{+}(x_3) = 0, \quad p_{2k}^{+}(x_3) = \cos \delta_k^{+} x_3 \quad \text{при} \quad \delta_k^{+} \lambda_2 = \pi k;$$

$$p_{1k}^{-}(x_3) = 0, \quad p_{2k}^{-}(x_3) = \frac{1}{\delta_k^{-}} \sin \delta_k^{-} x_3 \quad \text{в случае} \quad \delta_k^{-} \lambda_2 = \frac{2k-1}{2} \pi;$$

$$D^2 B_k^{\pm}(x_1, x_2) - \left( \frac{\delta_k^{\pm}}{\lambda} \right)^2 B_k^{\pm}(x_1, x_2) = 0.$$

Компоненты вектора перемещений потенциального состояния определяются соотношениями

$$u_{mjP}^{\pm}(x_1, x_2, x_3) = \sum_{p=1}^{\infty} n_{mp}^{\pm}(x_3) \partial_j C_p^{\pm}(x_1, x_2) \quad (j = 1, 2),$$

$$u_{m3P}^{\pm}(x_1, x_2, x_3) = \sum_{p=1}^{\infty} q_{mp}^{\pm}(x_3) C_p^{\pm}(x_1, x_2).$$

Здесь

$$D^2 C^{\pm}(x_1, x_2) - \left( \frac{\gamma^{\pm}}{\lambda} \right)^2 C^{\pm}(x_1, x_2) = 0;$$

$$n_1^{\pm}(x_3) = H_1^{\pm} \cos \gamma^{\pm}(x_3 - \lambda_2) + H_2^{\pm} \sin \gamma^{\pm}(x_3 - \lambda_2) + H_3^{\pm}(x_3 - \lambda_2) \cos \gamma^{\pm}(x_3 - \lambda_2) + H_4^{\pm}(x_3 - \lambda_2) \sin \gamma^{\pm}(x_3 - \lambda_2);$$

$$q_1^{\pm}(x_3) = Q_1^{\pm} \sin \gamma^{\pm}(x_3 - \lambda_2) + Q_2^{\pm} \cos \gamma^{\pm}(x_3 - \lambda_2) + Q_3^{\pm}((x_3 - \lambda_2) \sin \gamma^{\pm}(x_3 - \lambda_2) + k_{13}^{\pm} \cos \gamma^{\pm}(x_3 - \lambda_2)) + Q_4^{\pm}((x_3 - \lambda_2) \cos \gamma^{\pm}(x_3 - \lambda_2) - k_{13}^{\pm} \sin \gamma^{\pm}(x_3 - \lambda_2));$$

$$n_2^{+}(x_3) = H_5^{+} \cos \gamma^{+} x_3 + H_6^{+} x_3 \sin \gamma^{+} x_3;$$

$$q_2^{+}(x_3) = Q_5^{+} \sin \gamma^{+} x_3 + Q_6^{+}(x_3 \cos \gamma^{+} x_3 - k_{23}^{+} \sin \gamma^{+} x_3);$$

$$\begin{aligned}
n_2^-(x_3) &= H_5^- \sin \gamma^- x_3 + H_6^- x_3 \cos \gamma^- x_3; \\
q_2^-(x_3) &= Q_5^- \cos \gamma^- x_3 + Q_6^- (x_3 \sin \gamma^- x_3 + k_{23}^- \cos \gamma^- x_3); \\
k_{m3}^\pm &= \frac{3 - 4\nu_m}{\gamma^\pm}; \quad Q_i^\pm = \frac{1}{\lambda} a_i^\pm H_i^\pm \quad (i = \overline{1, 6}); \\
a_1^\pm &= a_3^\pm = -\gamma^\pm, \quad a_2^\pm = a_4^\pm = \gamma^\pm, \quad a_5^\pm = \mp \gamma^\pm, \quad a_6^\pm = \pm \gamma^\pm; \\
H_1^\pm &= (1 - \nu_2)((1 - 2\nu_1) \sin 2\gamma^\pm \lambda_1 - 2\gamma^\pm \lambda_1)(1 \mp \cos 2\gamma^\pm \lambda_2); \\
H_2^\pm &= 2(1 - 2\nu_1)(1 - \nu_2) \sin^2 \gamma^\pm \lambda_1 (1 \mp \cos 2\gamma^\pm \lambda_2); \\
H_3^\pm &= 2(1 - \nu_2) \gamma^\pm \sin^2 \gamma^\pm \lambda_1 (1 \mp \cos 2\gamma^\pm \lambda_2); \\
H_4^\pm &= -(1 - \nu_2) \gamma^\pm \sin 2\gamma^\pm \lambda_1 (1 \mp \cos 2\gamma^\pm \lambda_2); \\
H_5^\pm &= \mp 4(1 - \nu_1) \sin^2 \gamma^\pm \lambda_1 \left( (1 - 2\nu_2) \frac{\sin}{\cos} \gamma^\pm \lambda_2 \mp \gamma^\pm \lambda_2 \frac{\cos}{\sin} \gamma^\pm \lambda_2 \right); \\
H_6^\pm &= 4(1 - \nu_1) \gamma^\pm \sin^2 \gamma^\pm \lambda_1 \frac{\sin}{\cos} \gamma^\pm \lambda_2.
\end{aligned}$$

Отметим, что собственные значения  $\gamma^\pm$  удовлетворяют уравнениям

$$\begin{aligned}
F^\pm(\gamma) &= 2(1 - \nu_1) \sin^2 \gamma^\pm \lambda_1 \sin 2\gamma^\pm \lambda_2 \pm 2\gamma^\pm \lambda_2 \pm \\
&\pm G(1 - \nu_2)(\sin 2\gamma^\pm \lambda_1 + 2\gamma^\pm \lambda_1)(1 \mp \cos 2\gamma^\pm \lambda_2) = 0.
\end{aligned} \tag{3}$$

Все корни уравнений (3) являются действительными или комплексными, расположенными симметрично в четырех квадрантах плоскости. Рассмотрим некоторые частные случаи трансцендентных уравнений (3).

Если  $G = 0$  (внешние слои — абсолютно мягкие), то корни уравнений (3) асимптотически приближаются к множеству корней уравнений

$$\sin^2 \gamma^\pm \lambda_1 (\sin 2\gamma^\pm \lambda_2 \pm 2\gamma^\pm \lambda_2) = 0.$$

Когда  $G = \infty$  (внутренний слой — абсолютно мягкий), то множество собственных значений  $\gamma^\pm$  трансформируется к совокупности корней уравнений

$$(\sin 2\gamma^\pm \lambda_1 + 2\gamma^\pm \lambda_1)(1 \mp \cos 2\gamma^\pm \lambda_2) = 0.$$

В случае  $\lambda_1 = 0$  дисперсионные уравнения (3) сводятся к следующим:

$$\sin^2 \gamma^+ = 0, \quad \cos^2 \gamma^- = 0.$$

При  $\lambda_2 = 0$  из уравнений (3) следует

$$\sin^2 \gamma^+ = 0, \quad \sin 2\gamma^- + 2\gamma^- = 0.$$

Для  $G = 1$ ,  $\nu_1 = \nu_2$ ,  $\lambda_1 = \lambda_2 = 1/2$  уравнения (3) принимают вид

$$(\sin \gamma^+ + \gamma^+) \sin^2 \frac{\gamma^+}{2} = 0, \quad \sin 2\gamma^- + 2\gamma^- = 0.$$

Перемещения бигармонического состояния имеют вид

$$\begin{aligned}
 u_{11B}^{\pm}(x_1, x_2, x_3) &= \partial_1(\Phi^{\pm} + \Phi_C^{\pm} + a_2^{\pm}(x_3 - 1)^2 D^2 \Phi^{\pm}), \\
 u_{12B}^{\pm}(x_1, x_2, x_3) &= \partial_2(\Phi^{\pm} - \Phi_C^{\pm} + a_2^{\pm}(x_3 - 1)^2 D^2 \Phi^{\pm}), \quad u_{13B}^{\pm}(x_1, x_2, x_3) = a_1^{\pm}(x_3 - 1) D^2 \Phi^{\pm}, \\
 u_{21B}^+(x_1, x_2, x_3) &= \partial_1(e_0^+ \Phi^+ + \Phi_C^+ + e_2^+ x_3^2 D^2 \Phi^+), \quad u_{21B}^-(x_1, x_2, x_3) = \partial_1(e_1^- x_3 D^2 \Phi^-), \\
 u_{22B}^+(x_1, x_2, x_3) &= \partial_2(e_0^+ \Phi^+ - \Phi_C^+ + e_2^+ x_3^2 D^2 \Phi^+), \quad u_{22B}^-(x_1, x_2, x_3) = \partial_2(e_1^- x_3 D^2 \Phi^-), \\
 u_{23B}^+(x_1, x_2, x_3) &= e_1^+ x_3 D^2 \Phi^+, \quad u_{23B}^-(x_1, x_2, x_3) = e_0^- D^2 \Phi^-.
 \end{aligned}$$

Здесь

$$\begin{aligned}
 D^2 D^2 \Phi^{\pm}(x_1, x_2) &= 0; \quad e_0^+ = \frac{(\lambda_1 \nu_1 \nu_2 + \lambda_2)G + \lambda_1(1 - \nu_1)(1 + \nu_2)}{\Delta}; \\
 e_1^+ &= -\lambda \lambda_1 \frac{\Delta_1}{\Delta}, \quad e_2^+ = \frac{\lambda^2 \lambda_1}{2} \frac{\Delta_1}{\Delta}, \quad a_1^+ = \lambda \lambda_2 \frac{\Delta_1}{\Delta}, \quad a_2^+ = -\frac{\lambda^2 \lambda_2}{2} \frac{\Delta_1}{\Delta}; \\
 \Delta_1 &= \nu_1(1 - \nu_2)G - \nu_2(1 - \nu_1), \quad \Delta = \lambda_2(1 + \nu_1)(1 - \nu_2)G + \lambda_2 \nu_1 \nu_2 + \lambda_1; \\
 e_0^- &= -\lambda \lambda_1 \frac{\nu_1}{1 + \nu_1}, \quad e_1^- = \lambda^2 \lambda_1 \frac{\nu_1}{1 + \nu_1}, \quad a_1^- = \lambda \frac{\nu_1}{1 + \nu_1}, \quad a_2^- = -\frac{\lambda^2}{2} \frac{\nu_1}{1 + \nu_1}.
 \end{aligned}$$

Гармонические функции  $\Phi_C^{\pm}(x_1, x_2)$  связаны с бигармоническими  $\Phi^{\pm}(x_1, x_2)$  соотношением

$$\partial_2^2 \Phi_C^{\pm} = -\partial_1^2 \Phi_C^{\pm} = a_0^{\pm} D^2 \Phi^{\pm},$$

в котором

$$a_0^+ = \frac{\lambda_2(1 - \nu_2)G + \lambda_1(1 - \nu_1)}{\Delta}, \quad a_0^- = \frac{1}{1 + \nu_1}.$$

**Анализ результатов исследований трансцендентных уравнений.** Для численного нахождения комплексных корней характеристических уравнений (3) был использован принцип аргумента в сочетании с итерационным методом Ньютона и контурным численным интегрированием.

В табл. 1 при различных относительных жесткостях  $G$  и для  $\nu_1 = \nu_2 = 0,3$ ,  $\lambda_1 = 0,1$  приведены значения первых пяти корней  $\gamma_p^{\pm}$  уравнений (3) из первого квадранта комплексной плоскости. Ячейки таблицы содержат два значения: в числителе — собственные значения при симметричной деформации, а в знаменателе — при кососимметричной.

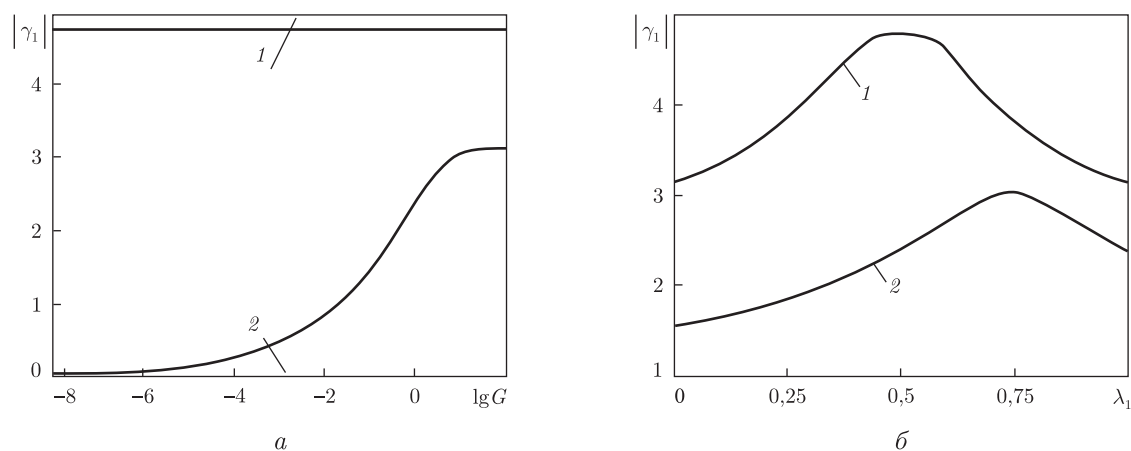
На рис. 1 приведены графики изменения модуля первого собственного значения  $\gamma_1^{\pm}$  уравнений (3) в зависимости от относительной жесткости  $G$  при  $\lambda_1 = 0,5$  (рис. 1, а) и относительной толщины внешних слоев  $\lambda_1$  при  $G = 1$  (рис. 1, б). Значения коэффициентов Пуассона  $\nu_1$ ,  $\nu_2$  принимались равными 0,3. Кривые 1 соответствуют симметричной задаче, кривые 2 — кососимметричной.

Уравнения (3) не имеют мнимых корней, поэтому потенциальное состояние представляет собой решение типа погранслоя, и характер проникания его внутрь области определяется первым по модулю корнем  $\gamma_1^{\pm}$ . При этом на интервале  $G \in (0; \infty)$  величины  $\gamma_1^{\pm}$  являются комплексными. Для различных жесткостей слоев величина  $\gamma_1^+$  является первым корнем



Таблиця 1

$p$	$G = 1,2$		$G = 2$		$G = 10$	
	$\text{Re } \gamma_p^\pm$	$\text{Im } \gamma_p^\pm$	$\text{Re } \gamma_p^\pm$	$\text{Im } \gamma_p^\pm$	$\text{Re } \gamma_p^\pm$	$\text{Im } \gamma_p^\pm$
1	3,2986550	0,6511617	3,3656792	0,5308196	3,4625671	0,2549146
	1,6387903	0,3375179	1,6782295	0,2722138	1,7310300	0,1282909
2	6,6870923	1,1564473	6,7780742	0,9739256	6,9291189	0,4966435
	4,9836930	0,9251128	5,0660329	0,7660662	5,1951009	0,3782366
3	10,126354	1,5124667	10,228531	1,3105504	10,403985	0,7117064
	8,4023289	1,3500764	8,4993655	1,1547254	8,6651721	0,6084501
4	13,602394	1,7632317	13,713506	1,5539416	13,894330	0,8815033
	11,859013	1,6489835	11,965885	1,4433662	12,146579	0,8038923
5	17,141195	1,9274459	17,256314	1,6992836	17,411069	0,9714106
	15,360803	1,8566744	15,475231	1,6409098	15,648802	0,9395790

Рис. 1. Зависимость модуля первого собственного значения  $\gamma_1^\pm$  от параметров  $G, \lambda_1$ 

уравнения  $\sin \gamma + \gamma = 0$ , и модуль ее значения  $|\gamma_1^+| \approx 4,78$ , а значение  $|\gamma_1^-| < \pi$ . При  $G \rightarrow \infty$  величина  $\gamma_1^-$  стремится к  $\pi$ , а при  $G \rightarrow 0$  — к нулю. Следовательно, в трехслойной пластине с более жестким наполнителем потенциальное решение проникает внутрь области сильнее, чем в пластине со слабым средним слоем. Чем жестче наполнитель, тем характер проникновения сильнее.

Изменение  $|\gamma_1^\pm|$  в зависимости от  $\lambda_1$  носит более сложный характер (см. рис. 1, б). Величины  $\gamma_1^\pm$  на всем интервале изменения  $\lambda_1 \in (0; 1)$  также остаются комплексными. В случае симметричной деформации (кривая 1) промежуток  $(0; 1)$  изменения параметра  $\lambda_1$  условно разбивается на два интервала  $(0; 0,5)$ ,  $(0,5; 1)$  в зависимости от характера поведения модуля первого собственного значения. В окрестности точки  $\lambda_1 = 0,5$  величина  $|\gamma_1^+|$  достигает наибольшего значения, приблизительно равного 4,78, и потенциальное решение проникает внутрь области слабее. В точках  $\lambda_1 = 0$  или  $\lambda_1 = 1$  величина  $\gamma_1^+ = \pi$ , и характер проникновения потенциального решения внутрь области наиболее сильный. В случае кососимметричной деформации (кривая 2) величина  $\gamma_1^-$  на интервале  $\lambda_1 \in (0; 1)$  изменяется от  $\pi/2$  (при  $\lambda_1 = 0$ ) до  $\approx 3,02$  (при  $\lambda_1 \approx 0,76$ ), а в точке  $\lambda_1 = 1$  значение  $|\gamma_1^-| \approx 2,39$ .

1. Altenbach H. Theories for laminated and sandwich plates. A review // Mech. of Composite Mater. — 1998. — 34, No 3. — P. 243–252.

2. *Carrera E.* Historical review of Zig-Zag theories for multilayered plates and shells // *Appl. Mech. Rev.* – 2003. – **56**, No 3. – P. 287–308.
3. *Пискунов В. Г., Рассказов А. О.* Развитие теории слоистых пластин и оболочек // *Прикл. механика.* – 2002. – **38**, № 2. – С. 22–56.
4. *Космодамианский А. С., Шалдырван В. А.* Толстые многосвязные пластины. – Киев.: Наук. думка, 1978. – 240 с.
5. *Устинов Ю. А.* Математическая теория поперечно-неоднородных плит. – Ростов-на-Дону: ООО ЦВВР, 2006. – 257 с.
6. *Алтухов Е. В., Кулиш И. Е.* Равновесие трехслойной пластины с жесткими торцами // *Вісн. Донецьк. ун-ту. Сер. А. Природничі науки.* – 2001. – № 1. – С. 314–321.
7. *Алтухов Е. В., Фоменко М. В.* Деформация трехслойных пластин в случае смешанных граничных условий на торцах // *Теорет. и прикл. механика.* – 2011. – № 2(48). – С. 29–39.
8. *Алтухов Е. В., Фоменко М. В.* Упругое равновесие трехслойной пластины с покрытыми диафрагмой плоскими гранями // *Вісн. Донецьк. нац. ун-ту. Сер. А. Природничі науки.* – 2011. – № 1. – С. 19–26.
9. *Ворович И. И., Кадомцев И. Г.* Качественное исследование напряженно-деформированного состояния трехслойной плиты // *Прикл. математика и механика.* – 1970. – **34**, № 5. – С. 870–876.
10. *Лурье А. И.* К теории толстых плит // *Там же.* – 1942. – **6**, № 2–3. – С. 151–168.

*Донецкий национальный университет*

*Поступило в редакцию 27.12.2011*

Академік НАН України **В. П. Шевченко, Є. В. Алтухов, М. В. Фоменко**

### **Деформація тришарових пластин з ковзним закріпленням торців і недосконалим контактом шарів**

*У тривимірній постановці розглянуто задачу пружної рівноваги тришарової ізотропної пластини симетричної будови. На лицьових площинах пластини виконуються умови плоского торця, а на межі поділу шарів має місце ковзний контакт. Одержано однорідні розв'язки рівнянь рівноваги в переміщеннях у вигляді суми бігармонічного, вихрового і потенціального станів. Здійснено аналітичні та чисельні дослідження трансцендентних рівнянь для знаходження власних значень. Досліджено характер прояву крайового ефекту.*

Academician of the NAS of Ukraine **V. P. Shevchenko, E. V. Altukhov, M. V. Fomenko**

### **Deformation of three-layer plates with the sliding clamping of ends and the incomplete contact of layers**

*In the three-dimensional statement, the problem of elastic equilibrium of a three-layer isotropic plate of symmetric structure is considered. The conditions of flat end hold at the plate faces, and the sliding contact is satisfied on the interface of layers. The homogeneous solutions of the system of equations of equilibrium in displacements are obtained as a sum of biharmonic, vortex, and potential states. The analytical and computational researches of the transcendental equations for the eigenvalues are carried out. The nature of a manifestation of the edge effect is studied.*



УДК 538.9:539.215

© 2012

О. І. Герасимов, Н. Вандевалле

## Щодо точних розв'язків задачі про перенесення імпульсу у неоднорідному гранульованому ланцюжку

(Представлено академіком НАН України А. Г. Загороднім)

*Знайдено нові точні розв'язки функціонально-диференціального рівняння, яке описує перенос механічного збурення в одновимірному вертикальному гранульованому ланцюжку із нелінійними контактами. Лінеаризоване у наближенні слабкої неоднорідності рівняння руху імпульсу відноситься до класу функціонально-диференціальних і, як показано в роботі, у всіх внутрішніх точках системи із лінійними взаємодіями має точний розв'язок у вигляді циліндричних функцій Бесселя першого роду. Показано, що у суцільних границях рівняння задовольняє солітоноподібний розв'язок. Знайдені класи точних розв'язків доповнюють відомі результати про динаміку збурень у гранульованих ланцюжках та можуть бути корисними для задач параметризації експериментальних даних з вивчення динаміки переносу механічних збуджень у низьковимірних гранульованих системах.*

Поширення хвиль у нелінійних системах вивчається протягом тривалого часу і результати досліджень детально висвітлені у численних літературних джерелах (див., наприклад, [1, 2]). Останнім часом інтерес до дослідження руху хвиль у дискретних мікромеханічних системах зростає у зв'язку з новими результатами, отриманими в експериментах з гранульованими ланцюжками. В серії робіт рух імпульсу у таких системах вивчався експериментально, чисельно і теоретично [3–10]. Так, наприклад, у [5] методом чисельного моделювання показано, що динаміка хвильового руху імпульсу, який рухається вздовж гранульованого ланцюжка з нелінійними контактами у зовнішньому гравітаційному полі описується розв'язками типу дисперсійних хвиль (нормальні моди).

Існування розв'язків несолітонного типу, істотно доповнює відомі нелінійні хвильові механізми передачі енергії [5, 11]. В нашій роботі у наближенні слабкої неоднорідності знайдено нові (порівняно з раніше відомими) класи точних розв'язків рівняння руху механічного імпульсу у вертикальному гранульованому ланцюжку, які, зокрема, визначаються в термінах функцій Бесселя першого роду, а також, у суцільній границі, функціями солітоноподібного типу. Знайдені типи розв'язків відкривають перспективи відповідних нових експериментів з оптимізації передачі енергії (імпульсу) в дискретних слабонелінійних, низьковимірних гранульованих системах.

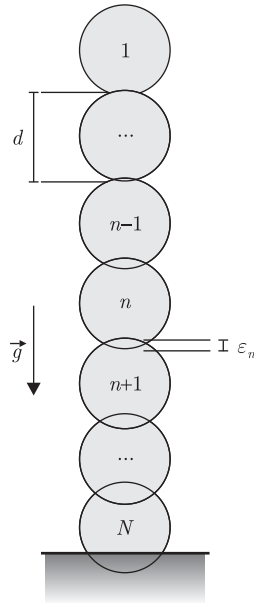


Рис. 1. Вертикальний гранульований ланцюжок у гравітаційному полі

**Функціонально-диференціальне рівняння руху і його розв'язок.** Розглянемо рівняння руху для функції зміщення  $n$ -ї частинки  $z_n$ , яке відповідає поширенню імпульсу у вертикальному гранульованому ланцюжку, схематично зображеному на рис. 1,

$$\frac{d^2 z_n}{dt^2} = \gamma \{ [d - (z_n - z_{n-1})]^\delta - [d - (z_{n+1} - z_n)]^\delta \} + g, \quad (1)$$

де  $\gamma = C/m$ ;  $m$  — маса окремої частинки-гранули;  $d$  — діаметр недеформованої частинки;  $C = E\sqrt{d}/(3(1-\nu^2))$  — силова константа;  $E$  — модуль Юнга;  $\nu$  — константа Пуассона [12]. Параметр нелінійності контакту  $\delta$  може набувати різних значень. Наприклад, у разі міжчастинкових контактів герцевського типу він дорівнює  $\delta = 3/2$ .

Нехтуючи роллю, яку відіграють дисипативні ефекти (вони можуть бути значними при збільшенні інтенсивності збурень), зауважимо, що нелінійна взаємна деформація контактуючих частинок для ланцюжка, розташованого горизонтально, може вважатися однаковою для будь-якої пари сусідніх частинок. Навпаки, у разі вертикально розташованого ланцюжка (завдяки впливу гравітаційного поля) вона має залежати від положення (номера) контакту.

Введемо нову змінну  $\varphi_n$  за таким правилом:

$$\varphi_n = z_n - \left[ nd - \sum_{k=1}^n \varepsilon_k \right], \quad (2)$$

де  $\varepsilon_k$  — геометричний фактор, який залежить від параметрів, що характеризують перекриття пари сусідніх частинок.

Якщо вибрати умову рівноваги у найпростішому вигляді

$$gk = \gamma \varepsilon_k^\delta. \quad (3)$$

то, враховуючи (3), (4), а також використовуючи припущення слабкої неоднорідності у вигляді

$$|\varphi_{k+1} - \varphi_k| < \varepsilon_k, \quad (4)$$

керуюче рівняння (1) можна наближено подати у формі

$$\frac{d^2 \varphi_n}{d\tau^2} = \kappa_{n+1}(\varphi_{n+1} - \varphi_n) - \kappa_n(\varphi_n - \varphi_{n-1}), \quad (5)$$

де  $\tau = t\sqrt{\kappa_n}(\gamma/g)^{1/2\delta}$ ,  $\kappa_n = n^{1-1/\delta}$  може бути інтерпретована як перенормована силова стала, яка внаслідок гравітаційної прекомпресії ланцюжка залежить від номера контакту (частинки).

Зауважимо, що зроблене припущення про слабку неоднорідність системи (4) зводить природно неоднорідне (внаслідок присутності гравітації) рівняння руху до однорідної форми, яка є притаманною горизонтальній задачі, але із силовими сталими, що залежать від номера частинки (контакту).

Перепишемо рівняння (5) у такій формі:

$$\frac{d^2 \varphi_n}{dT^2} = \frac{\kappa_{n+1}}{\kappa_n} \varphi_{n+1} - \left[ 1 + \frac{\kappa_{n+1}}{\kappa_n} \right] \varphi_n + \varphi_{n-1}, \quad (6)$$

де  $T = t$ . Звернемо увагу на те, що в рівнянні (6) коефіцієнти при  $\varphi_n$  і  $\varphi_{n+1}$  вже для  $n \geq 3$  менш ніж на 10 відсотків відрізняються від двійки і одиниці, відповідно. Зважаючи на цю обставину і спрощуючи (6) з вищезгаданою мірою точності, отримуємо

$$\frac{d^2 \varphi_n}{dT^2} = \varphi_{n+1} - 2\varphi_n + \varphi_{n-1}. \quad (7)$$

Функціонально-диференціальне рівняння (7), яке у випадку однорідного ланцюжка має точний розв'язок у вигляді [14]

$$\varphi_n(\tau) = C J_{2n}(2\tau), \quad (8)$$

який є справедливим для будь-якої внутрішньої точки, крім граничних, що обмежують систему. Тут  $C$  — є стала значення якої визначається граничними умовами,  $J_{2n}(2T)$  — функція Бесселя першого роду з цілими індексами.

Повертаючись до початкових змінних, розв'язок (8) можна переписати так:

$$\varphi_n(t) = C J_{2n} \left( 2\sqrt{g\delta} \left( \frac{\gamma}{g} \right)^{1/2\delta} t \right). \quad (9)$$

Рівняння (9) дозволяє вивчати вплив параметрів системи на динаміку імпульсів (в межах зроблених припущень) і відіграє роль матеріального співвідношення.

Користуючись отриманими розв'язками, неважко також знайти розв'язок рівняння (7) неоднорідного ланцюжка, а також встановити рівняння для визначення швидкості.

В асимптотичних границях розв'язок (8) поводитьсь у відповідності з такими апроксимаціями [14]:

$$\varphi_n(T) = \begin{cases} \frac{1}{(2n)!} (T)^{2n}, & 0 < \sqrt{2}T < \sqrt{n + \frac{1}{2}}, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi T}} \cos\left(2T - \pi n - \frac{\pi}{4}\right), & 2T \gg 4n^2 - \frac{1}{4}, \\ \frac{1}{2\sqrt{\pi n}} \left(\frac{eT}{2n}\right)^{2n}, & n \gg \frac{T}{\sqrt{2}}. \end{cases} \quad (10)$$

Розв'язок стаціонарної форми рівняння (7)

$$\varphi_{n+1} - 2\varphi_n + \varphi_{n-1} = 0 \quad (11)$$

належить до класу періодичних функцій

$$\varphi_n = A \sin \pi n. \quad (12)$$

Відповідний потенціал задачі  $U_n(\varphi_n)$ , як функція  $\varphi_n$ , має бути введено за допомогою співвідношення:

$$-\frac{\partial U_n}{\partial \varphi_n} = \varphi_{n+1} - 2\varphi_n + \varphi_{n-1}. \quad (13)$$

Отримані результати можуть бути корисними для інтерпретації фізичних експериментів з вивчення переносу енергії механічних збуджень в одновимірній гранульованій системі з параметрами, наближеними до умов розглянутої задачі.

**Рух імпульсу збурення у континуальній границі.** У випадку ланцюжків достатньої довжини проходження імпульсу крізь систему може бути досить адекватно описано у континуальному наближенні. Повернемося до рівняння (5). Приймаючи  $n \rightarrow h$ ;  $\kappa_n \rightarrow \kappa(h^{1-1/\delta})$ ;  $\kappa_{n+1} \rightarrow \kappa((h + \delta h)^{1-1/\delta})$ ;  $\varphi_n \rightarrow \varphi(h)$ ;  $\varphi_{n+1} \rightarrow \varphi(h + \delta h)$ , після нескладних маніпуляцій отримуємо континуальну форму керуючого рівняння

$$\frac{d^2 \varphi}{d\tilde{t}^2} = \frac{\partial}{\partial h} \kappa(h) \frac{\partial \varphi}{\partial h}, \quad (14)$$

де  $h$  — глибина системи (аналог номера частинки);  $\tilde{t} = aT$  — безвимірний час. Як відомо, лінійне рівняння (14) має розв'язок у вигляді дисперсійної хвилі, який детально проаналізовано в [5]. Звернемо також увагу на те, що функції

$$\varphi(\tilde{t}) = A\tilde{t} + B, \quad \varphi(h) = -\delta B + e^{A/\delta} |h|^{1/\delta} \quad (15)$$

є точними розв'язками рівняння (14), які залежать лише від  $\tilde{t}$  або лише від  $h$  (тут  $A$  та  $B$  — відповідні сталі). Вкажемо тепер, що рівняння (14) (крім вище визначених) має ще один точний розв'язок, який дається співвідношенням [15]

$$\varphi(h, \tilde{t}) = c_1 + c_2 \left[ k(\tilde{t} + c_3)^2 - k \left( \frac{2}{\eta} \right)^2 h^\eta \right]^{-\xi/2\eta}, \quad (16)$$

де  $c_1$ ,  $c_2$  та  $c_3$  — константи;  $\xi = 1 - 1/\delta$  та  $\eta = 1 + 1/\delta$ ,  $k = \pm 1$ . Для випадку системи з герцевськими контактами маємо  $\xi = 1/3$  та  $\eta = 5/3$ . Розв'язок (16) можна інтерпретувати як специфічну солітоноподібну хвилю. Внаслідок того, що швидкість  $v = d\varphi/dt$ , співвідношення для швидкості за допомогою (16) може бути знайдено тривіально. Також може бути визначений відповідний потенціал, який задовольняє співвідношення  $-\partial U/\partial\varphi = \partial/\partial h[\kappa(h)\partial\varphi/\partial h]$ . Аналіз одержаних результатів, у застосуванні до визначення кінетичної ( $E_k = \dot{\varphi}^2/2$ ) або повної ( $E = E_k + U$ ) енергії системи, показує, що вони обидві не задовольняють закон рівнорозподілу. Як наслідок не відбувається внутрішньої термалізації системи.

На практиці існує інерційний зсув фаз, який розділяє за фазою швидкість сигналу та швидкість гранул. Внаслідок того, що система не є термалізованою, можна очікувати, що під час поширення імпульсу вздовж системи одна або декілька частинок можуть втрачати контакти з рештою системи та переходити до стану балістичного руху у проміжках між послідовними зіткненнями з сусідніми гранулами. За спеціальних умов нерівномірний розподіл енергії може призвести до розподілу системи на підсистеми, в яких гранули, зокрема, можуть перебувати у стані балістичного руху у полі тяжіння. Саме такі стани спостерігалися в експериментах із гранульованими ланцюжками [7].

Асимптотично вищезгаданий сценарій термалізації у моделі з нерівномірним розподілом енергії може призвести до формування станів з мінімальним значенням повної енергії. Дослідження таких квазістаціонарних станів та поведінка системи в їх околі є важливим напрямком як теоретичних, так і експериментальних досліджень.

Таким чином, в роботі знайдено клас точних розв'язків лінеарізованого рівняння руху для механічного імпульсу у вертикальному гранульованому ланцюжку. Керуюче рівняння, яке після лінеарізації набуває однорідної форми з перенормованими силовими сталими, що, у свою чергу, залежать від номера контакту, відноситься до класу функціонально-диференціальних і інтегрується точно. Відповідний розв'язок знайдено в класі циліндричних функцій Бесселя першого роду. Він є справедливим у будь-якій внутрішній точці системи. Довільним граничним умовам відповідає відповідна лінійна комбінація отриманих розв'язків.

У розглянутій моделі спостерігається скейлінг. У континуальній границі розглянутої задачі також знайдено новий точний розв'язок у вигляді солітоноподібної хвилі. Отримані результати істотно доповнюють клас відомих точних розв'язків у вигляді дисперсійних хвиль та солітонів. Після їх експериментальної перевірки вони можуть сприяти розробці адекватних моделей для параметризації процесів переносу енергії (імпульсу) в низьковимірних, слабонеоднорідних, мікромеханічних системах, прикладом яких, зокрема, виступають гранульовані ланцюжки.

*Автори щиро вдячні акад. НАН України А.Г. Загородньому за інтерес до роботи та стимулюючі обговорення отриманих результатів, Фонду фундаментальних досліджень Бельгії та науковому дивізіону НАТО — за підтримку, а також університету м. Льєж, де виконувалася робота, — за гостинність.*

1. Bhatnagar P. L. Nonlinear waves in one-dimensional dispersive systems. — The Clarendon Press; Oxford University Press: New York, 1979. — 142 p.
2. Jackson E. A. Perspectives of nonlinear dynamics. — Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1990. — 632 p.
3. Nesterenko V. F. Dynamics of heterogeneous materials. — New York: Springer, 2001. — 510 p.
4. Coste C., Falcon E., Fauve S. Solitary waves in a chain of beads under Hertz contact // Phys. Rev. E. — 1997. — **56**. — P. 6104–6117.
5. Sen S., Hong J., Bang J. et al. Solitary waves in the granular chain // Phys. Rep. — 2008. — **462**. — P. 21–66.
6. Somfai E., Roux J.-N., Snoeijer J. H. et al. Elastic wave propagation in confined granular systems // Phys. Rev. E. — 2005. — **72**. — 021301, 18 p.

7. Герасимов О. И., Вандевалле Н., Снівак А. Я. та ін. Стационарні стани у 1D системі непружних частинок // Укр. фіз. журн. – 2008. – **53**, № 11. – С. 1129–1137.
8. Hinch E. J., Saint-Jean S. The fragmentation of a line of balls by an impact // Proc. Roy. Soc. London A. – 1999. – **455**. – P. 3201–3220.
9. Job S., Santibanez F., Tapia F., Melo F. Wave localization in strongly nonlinear Hertzian chains with mass defect // Phys. Rev. E. – 2009. – **80**. – 025602, 4 p.
10. Harbola U., Rosas A., Romero A. et al. Pulse propagation in decorated granular chains: an analytical approach // Ibid. – 2009. – **80**. – 051302, 9 p.
11. Lima Dias Pinto I., Rosas A., Romero A. H., Lindenberg K. Pulse propagation in a chain of o-rings with and without precompression // Ibid. – 2010. – **82**. – 031308, 6 p.
12. Landau L. D. Theory of elasticity. 3rd ed. – Heinemann: Butterworth, 1986. – 200 p.
13. Pinney E. Ordinary difference-differential equations. – Berkley; Los Angeles: Univ. of California Press, 1958. – 262 p.
14. Abramowitz M., Stegun I. A. Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables. – New York: Dover, 1966. – 1046 p.
15. Polyanin A. D., Zaitsev V. F. Handbook of exact solutions for ordinary differential equations. 2nd ed. – Boca Raton: Chapman & Hall, CRC Press, 2003. – 787 p.

Одеський державний екологічний університет  
Університет м. Льєж, Бельгія

Надійшло до редакції 23.12.2011

**О. И. Герасимов, Н. Вандевалле**

### **К задаче о распространении импульса в неоднородной гранулированной цепочке**

*В работе, в приближении слабой неоднородности, найдены точные решения дифференциально-разностного уравнения в задаче о передаче импульса в вертикальной гранулированной цепочке с нелинейными контактами, которое выражается с помощью функций Бесселя первого рода. В континуальном приближении для управляющих уравнений также найдено новое точное решение в виде функции солитоноподобного типа. Найденные классы точных решений существенно дополняют известные решения типа дисперсионных мод, а также солитонного типа (последние — в случае нелинелиризованных уравнений движений). Полученные результаты свидетельствуют о том, что передача импульса в слабонеоднородных гранулированных цепочках, не может быть описана с помощью универсального волнового подхода.*

**O. I. Gerasymov, N. Vandewalle**

### **On the exact solutions of the problem of impulsive propagation in an inhomogeneous granular chain**

*A rigorous solution of the functional differential equation describing the signal propagation through a vertical granular chain with nonlinear contacts has been found in the approximation of a weak inhomogeneity in the form of a Bessel function of the first order. The solution is valid at all points inside of the system except for boundaries. The appropriate boundary conditions are satisfied by the linear combinations of Bessel functions. The relevant scaling behavior is outlined. In the continuum limit of the governing transport equation, a new rigorous solution in the form of soliton-like modes has been also found. The obtained classes of analytical solutions are a significant supplement either to the dispersive wave modes or to the soliton solution (in case of a nonlinearized form of the transport equation), which has been reported for such a system earlier. The relevant experiments directed to the experimental study of the discovered dynamics are discussed.*





УДК 631.2

© 2012

А. П. Слесаренко, О. С. Сорока

## Термостабілізація підлог приміщень з максимальним акумулюванням тепла

(Представлено членом-кореспондентом НАН України О. Л. Шубенком)

*На базі розв'язання серії зворотних задач теплопровідності запропоновано новий підхід щодо ідентифікації енергопотоків у електротеплоакумулявальній системі обігріву приміщення, що одночасно забезпечує заданий рівень нагріву поверхні підлоги та максимальне акумулювання тепла. Побудовано енергограми для систем нагрівальних елементів, які демонструють можливість раціонального використання тепла за рахунок його максимального акумулювання, й температурні розподіли на поверхні підлоги, що характеризують високий ступінь термостабілізації.*

**Постановка проблеми.** Раціональне використання енергоресурсів і енергозбереження в сучасних умовах досить частих і різких коливань параметрів клімату не може бути виконано тільки за рахунок високої теплоізоляції огорожувальних конструкцій будинків і споруд. Задачі підвищення енергоефективності таких об'єктів можуть бути розв'язані також на основі сучасних інформаційних технологій і комп'ютерних систем керування [1]. Застосування інформаційних технологій щодо контролю теплового режиму приміщень з урахуванням порівняно повільних перехідних процесів в елементах споруд при зміні зовнішніх теплових умов дозволить при використанні певного набору поточних даних про тепловий стан об'єкта (може забезпечити нескладна спостерігаюча вимірювально-інформаційна система — ВІС) і математичної теплової моделі приміщення одержати функції керування системою обігріву [2]. Останнє може бути визначено на основі розв'язання зворотної задачі теплопровідності щодо одержання величин необхідних потужностей нагрівальних елементів для стабілізації теплового стану об'єкта з урахуванням запізнювання.

Структурно споруда розглядається як система двох підобластей, що перебувають у тепловому контакті за рахунок конвекційного теплообміну. Одна з них містить нагрівальні елементи — нагрівальна система (НС) у вигляді масивного паралелепіпеда, одна із граней

якого робоча — поверхня підлоги, п'ять інших контактують із ґрунтом. Друга підсистема — приміщення частково або повністю обмежене огорожувальними конструкціями, має із НС спільну грань (вищезгадана поверхня підлоги), рівень нагрівання  $T_f^*$  якої повинен підтримуватися постійним відповідно до певних вимог. Така узагальнена структурна модель і вимога до його основного параметра  $T_f^*$  відповідає цілому ряду промислових і цивільних споруджень, наприклад, криті площадки, стадіони, храмові спорудження, полотно автодороги, що обігривається, сільськогосподарські приміщення.

**Аналіз можливих підходів.** НС являє собою [3, 4] шарувату пласку структуру, що має у загальному випадку довільне число  $N$  шарів з різних будівельних матеріалів.  $M$  шарів ( $1 \leq M \leq N$ ) активні, тобто будучи підключеними до джерел енергії, виділяють тепло в НС. Задано також кількість нагрівальних елементів трубчастого типу в активних шарах, погонна потужність тепловідлення яких  $P_{ij}$  (Вт/м,  $i$  — номер шару,  $j$  — номер нагрівального елемента) може регулюватися. Всього таких однотипних нагрівачів у НС налічується  $K$  штук.

Таким чином, підтримка заданого рівня нагрівання  $T_f^*$  робочої поверхні при заданих умовах теплообміну споруди із навколишнім середовищем може бути забезпечена шляхом параметричної ідентифікації наявних  $K$  теплових джерел. Багаторушне по глибині розміщення нагрівальних елементів дозволяє накопичувати частину енергії (акумулювати тепло) у часи пільгового тарифу енергоспоживання або при наявності лишків енергії, які можуть постачати, наприклад, нетрадиційні поновлювані джерела. Далі розглядається варіант 3-ярусної електротеплоакумулювальної НС, деякі режими роботи якої описані в роботах [3, 4]. Обмежимося двовимірним випадком системи, однорідної у напрямку нагрівальних елементів.

Задачу параметричної ідентифікації НС для моментів часу  $\tau = \tau_l$  сформулюємо як задачу мінімізації функціонала вигляду

$$I_l = \int_0^B [T_l(y, \tau_l; P_1^{(l)}, \dots, P_K^{(l)}) - T_f^*]^2 dy, \quad (1)$$

де  $B$  — напівширина поверхні підлоги (в площині  $y = 0$  прийнята умова симетрії);  $T_l(y, \tau_l; P_1^{(l)}, \dots, P_K^{(l)})$  — температурне поле в площині  $x = A$  на поверхні підлоги;  $P_1^{(l)}, \dots, P_K^{(l)}$  — потужності джерел у момент часу  $\tau = \tau_l$ .

Для забезпечення заданого рівня нагрівання  $T_f^*$  в поточний момент часу  $\tau = \tau_l$  необхідні такі реалізації розподілу потужності джерел  $\{P_k^{(l)}\}_{k=1, \dots, K}$ , які мінімізують функціонал (1). Оскільки постійна часу НС  $\tau_{уст}$  досить значна (від декількох годин до десятків годин), то, вибираючи інтервал опитування ВІС  $\Delta\tau$  набагато меншим постійної часу  $\Delta\tau \ll \tau_{уст}$ , розв'язок нестационарної задачі теплопровідності можна замінити послідовністю задач теплопровідності для сталого режиму. При цьому розв'язком рівнянь теплопровідності будуть відповідати розв'язки системи рівнянь, що мінімізують функціонал (1):

$$\frac{\partial I_l}{\partial P_k^{(l)}} = 0, \quad k = 1, \dots, K. \quad (2)$$

Пропонується три різних підходи до розв'язання таких нестационарних задач. Перший варіант — застосування методу прямих — дозволяє одержати послідовність граничних задач

для рівняння теплопровідності усталеного режиму, що приводять до рівняння для моменту часу  $\tau = \tau_l$ :

$$\frac{\partial^2 T_i^{(l)}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_i^{(l)}}{\partial y^2} - \frac{1}{a_i \Delta \tau} T_i^{(l)} = -\frac{1}{a_i \Delta \tau} T_i^{(l-1)} - \frac{1}{\lambda_i} p_i^{(l)}, \quad (3)$$

де  $a$  — коефіцієнт температуропровідності шарів; шукані функції розподілу температури  $T_i^{(l)} = T_i^{(l)}(x, y, \tau_l)$  в шарах НС ( $i = 1, \dots, N$ ) повинні задовольняти умови спряження в площинах контакту шарів і обрані граничні умови на зовнішніх границях;  $p_i^{(l)}$  — розподіл щільності потужності джерел в  $i$ -му шарі.

Інші варіанти розглядаються як теоретико-експериментальні. У другому варіанті вихідні рівняння нестационарної теплопровідності зводяться до послідовності задач

$$\frac{\partial^2 T_i^{(l)}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_i^{(l)}}{\partial y^2} = \frac{1}{a_i \Delta \tau} T_i^{(l)*} - \frac{1}{a_i \Delta \tau} T_i^{(l-1)} - \frac{1}{\lambda_i} p_i^{(l)}, \quad (4)$$

де значення температури в шарах  $T_i^{(l)*}$  визначаються з даних ВІС, які можуть бути наведені у вигляді інтерполяційних поліномів.

І, нарешті, у третьому варіанті розв'язання нестационарної задачі теплопровідності для НС розподіл температури в її об'ємі за умови регулярності теплових процесів можна шукати у вигляді

$$T(x, y, \tau; P_1, \dots, P_K) = e^{-p\tau} T_{\text{поч}} + (1 - e^{-p\tau}) \cdot T_{\text{уст}}(x, y; P_1, \dots, P_K), \quad (5)$$

де  $p = \tau_{\text{уст}}^{-1}$  — постійна часу нагрівання (охолодження), поточний параметр, що залежить від поточних умов теплообміну, значення якого визначається на основі даних ВІС;  $T_{\text{поч}}$ ,  $T_{\text{уст}}$  — температура НС у початковий момент часу й температурний розподіл у сталому режимі.

Таким чином, задача пошуку оптимального розподілу потужності джерел НС для забезпечення заданого рівня нагрівання робочої поверхні  $T_f^*$  споруди, що перебуває під впливом зовнішніх кліматичних факторів, які змінюються за часом, може бути зведена до розв'язання серії задач сталого режиму теплопровідності для розглянутої НС. Далі індекс належності параметра задачі до моменту часу ( $l$ ) скрізь опускаємо.

**Аналіз сталого режиму.** Для багатошарової НС моделювання теплових процесів зводиться до розв'язання задач теплопровідності усталеного режиму в кожному шарі:

$$\frac{\partial^2 T_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial y^2} = -\frac{1}{\lambda_i} p_i(y), \quad i = 1, \dots, N, \quad 0 \leq x \leq x_N = A, \quad 0 \leq y \leq B, \quad (6)$$

$$T_1(x, y)|_{x=0} = T_0; \quad -\lambda_N \frac{\partial T_N}{\partial x} \Big|_{x=A} = \alpha(T_N - T_e)|_{x=A}, \quad (7)$$

$$\frac{\partial T_i}{\partial y} \Big|_{y=0} = 0; \quad T_i + h \frac{\partial T_i}{\partial y} \Big|_{y=B} = T_{s,i}, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i, \quad (8)$$

$$\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial x} \Big|_{x=x_i} = \lambda_{i+1} \frac{\partial T_{i+1}}{\partial x} \Big|_{x=x_i}; \quad T_i|_{x=x_i} = \left( T_{i+1} - r_i^* \lambda_{i+1} \frac{\partial T_{i+1}}{\partial x} \right) \Big|_{x=x_i}, \quad 0 \leq y \leq B, \quad (9)$$

де  $i$  — номер шару (відлік ведеться знизу до поверхні підлоги);  $x_{i-1} \leq x \leq x_i$  — область локалізації  $i$ -го шару;  $T_i = T_i(x, y)$  — розподіл температури по частковій області —  $i$ -му шару;  $p_i = p_i(y)$  — задана функція щільності джерел тепла, розподілених по  $i$ -му шару, Вт/м<sup>3</sup>;  $\lambda_i$  — коефіцієнт теплопровідності матеріалу  $i$ -го шару;  $T_e$  — температура повітряного середовища на деякому віддаленні від поверхні підлоги;  $T_{s,i}$  — температура ґрунту поза НС по її товщі (висоті), приймається постійною в межах кожного шару;  $r_i^*$  — термічні контактні опори між шарами;  $\alpha$  — коефіцієнт тепловіддачі з поверхні підлоги у повітряне середовище, приймається постійною величиною;  $h = \lambda^*/\alpha_s$  — параметр теплопередачі із блоку НС у ґрунт через бічну стінку, приймається постійною величиною по всій глибині, при цьому  $\lambda^*$  — деяке усереднене значення коефіцієнта теплопровідності НС по її товщі;  $\alpha_s$  — коефіцієнт тепловіддачі за умовами 3-го роду.

Для одержання аналітичних рішень сформульованої математичної моделі будемо вважати коефіцієнт тепловіддачі  $\alpha$  константою, що в рамках теоретико-експериментального підходу може бути кореговано при діагностиці теплових процесів НС у режимі реального часу.

В результаті розв'язання задачі теплопровідності, з застосуванням методу кінцевих перетворень [3], отримано функціональну залежність температури поверхні підлоги  $T_f = T(x_N, y)$  (як однієї з складових розв'язку) від наявних теплоти повітряного середовища над поверхнею підлоги, глибинного ґрунту й ґрунту за бічною стінкою НС (відповідно  $T_e, T_0, T_s$ ), а також потужності кожного окремого нагрівального елемента  $\{P_k^{(l)}\}_{k=1, \dots, K}$  в поточний момент часу:

$$T(x_N, y, \tau; P_1, \dots, P_K) = e^{-p\tau} T_{\text{поч}} + (1 - e^{-p\tau}) T_{\text{уст}}(x_N, y; P_1, \dots, P_K).$$

Таким чином, встановлено зв'язок між стандартами на нагрівання поверхні підлоги  $T_f^*$  й потужністю енергопотоків у НС в реальних умовах теплообміну споруди з навколишнім середовищем, що дозволяє реалізувати *структурно-функціональне* керування енергопотоків. Це є дуже важливою властивістю запропонованої НС, тому що дозволяє при наявності надлишків енергії або у разі обігріву приміщення в періоди зниженого тарифу на енергоносії акумулювати в самій НС частину споживаної енергії у вигляді тепла (див. рис. 1). При цьому 3-ярусна структура НС дозволяє робити таке заощадження енергії ефективно — необхідна частина енергії використовується для забезпечення заданого стандарту нагрівання підлоги  $T_f^*$ , решта акумулюється в нижніх ярусах НС.

Наочний приклад щодо оптимізації режиму споживання, коли 80% енергії надходить у верхній ярус, а надлишок — у середній, наведено серією кривих та діаграм на рис. 1. Показано очікувані розподіли температури на поверхні підлоги для стандартів нагрівання  $T_f^* = 18$  °С й  $T_f^* = 38$  °С і відповідні енергограми (погонні потужності нагрівачів) при різних значеннях тепловтрат через бічну стінку НС:  $\alpha_s = 0$  — випадок ідеальної теплоізоляції,  $\alpha_s = 0,75$  Вт/(м<sup>2</sup> · К) і  $\alpha_s = 1,5$  Вт/(м<sup>2</sup> · К). Спостерігається термостабілізація підлоги — тобто заданий рівень нагрівання поверхні підлоги точно забезпечується в точках проекції осей нагрівальних елементів на поверхню підлоги, між ними має місце лише незначне відхилення від заданого рівня, причому тим більше, чим глибше розташований активний шар.

Таким чином, можна зробити такі висновки. 1. Запропоновано методологію розв'язання комплексної проблеми оптимального структурно-функціонального керування енергопото-

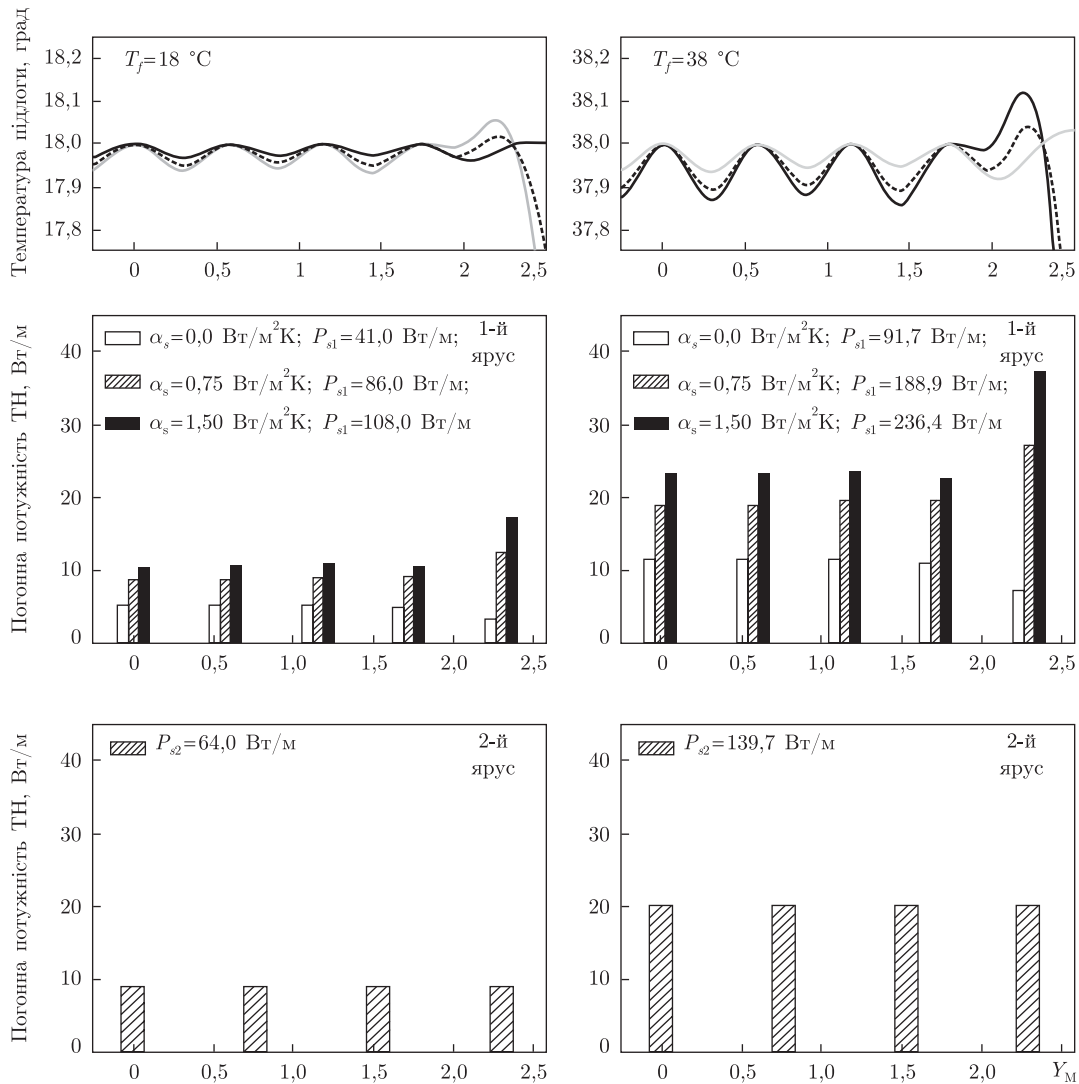


Рис. 1. Розподіл температури та енергограми розподілу потужності нагрівачів у двох ярусах системи обігріву

ками в нагрівальній системі споруди, що дозволяє одночасно забезпечувати заданий стандарт нагрівання робочої поверхні споруди й акумуляцію енергії. 2. Вперше сформульовано й розв'язано в рамках теоретико-експериментального підходу задачу про ефективний розподіл енергопотоків у нагрівальній системі на основі розв'язання серії зворотних задач теплопередачі з використанням реальних даних про тепловий стан нагрівальної системи в режимі реального часу. 3. Ідентифікація енергопотоків при забезпеченні заданих стандартів обігріву робочої поверхні споруди дозволяє проводити аналіз і прогнозувати рівень енергозбереження при структурно-функціональному керуванні енергопотокими.

1. Табулициков Ю. А., Бродач М. М., Шилкин Н. В. Энергоэффективные здания. – Москва: АВОК-ПРЕСС, 2003. – 200 с.
2. Алифанов О. М. Обратные задачи теплообмена. – Москва: Машиностроение, 1988. – 280 с.
3. Слесаренко А. П., Сорока О. А. Математичне моделювання термостабілізації підлог приміщень з урахуванням максимального теплоакмулювання в системі обігріву // Пробл. машиностроения. – 2011. – 14, № 1. – С. 31–37.

4. Слесаренко А. П., Сорока А. С. Математическое моделирование обогрева сооружений на базе идентификации распараллеленных энергопотоков // Вісн. ХНУ. Сер. МІА. – 2011. – № 987. – С. 120–130.

Інститут проблем машинобудування  
ім. А. М. Підгорного НАН України, Харків

Надійшло до редакції 06.01.2012

**А. П. Слесаренко, А. С. Сорока**

### **Термостабілізація полов приміщень с максимальним аккумулятивним теплом**

*На основі рішення серії обернутих задач теплопровідності запропоновано новий підхід для ідентифікації енергопотоків в електротеплоаккумуляційній системі обігріву приміщення, який одночасно забезпечує заданий рівень нагріву поверхності пола і максимальне накопичення тепла. Побудовано енергограми для систем нагрівальних елементів, які демонструють можливість раціонального використання тепла за рахунок його максимального накопичення, і температурні розподіли на поверхності пола, які характеризують високу ступінь термостабілізації.*

**A. P. Slesarenko, A. S. Soroka**

### **Thermostabilization of premises' floor with maximum heat accumulation**

*On the basis of solving a series of inverse problems for heat conductivity, a new approach to the identification of power flows in electroheated system with heat accumulation for premises, which simultaneously provides the set level of heating of the surface of a floor and the maximum accumulation of heat, is offered. Power diagrams for a system of heating elements, which show a possibility of rational use of heat at the expense of its maximum accumulation, and temperature distributions for the surface of a floor which characterize a high degree of thermostabilization are constructed.*



УДК 551.46:532

© 2012

Академик НАН Украины В. А. Иванов, И. А. Овчаренко,  
А. В. Прусов, М. В. Шокуров

## Моделирование катастрофических паводков в регионе Южного берега Крыма

*На основе последовательного применения региональной модели атмосферной циркуляции и гидравлической модели речного стока восстановлена картина развития экстремальных ливневых паводков на малых реках севастопольского региона и Южного берега Крыма. Полученные результаты можно рассматривать как первый шаг на пути краткосрочного прогнозирования неблагоприятных и опасных процессов в Крыму — паводков и селей.*

Одной из особенностей гидрологического режима рек и временных водотоков Южного берега Крыма (ЮБК) является формирование в течение всего года паводков, обусловленных выпадением интенсивных ливневых осадков [1]. При этом реки и временные водотоки могут за несколько и на несколько часов превратиться из ручейков в потоки, в десятки и сотни раз превосходящие свои среднегодовые значения. Иногда (раз в 20–50 лет) эти потоки становятся катастрофическими [2]. Именно такие редкие ливневые паводки переводят задачу прогноза экстремальных паводков из просто интересных гидрологических задач в разряд самых актуальных. На начальном этапе решения этой задачи попытаемся реконструировать несколько *известных случаев* развития экстремальных паводков. Будем последовательно применять адаптированные к региону ЮБК мезомасштабную атмосферную модель [3, 4] и гидравлическую модель речного стока [5].

**Атмосферная модель.** В отделе взаимодействия атмосферы и океана Морского гидрофизического института НАН Украины с начала 2007 г. выполняется оперативный прогноз атмосферной циркуляции для региона Черного моря (<http://vao.hydrophys.org>). Система анализа и прогноза атмосферной циркуляции основана на свободно распространяемой мезомасштабной модели MM5 версии 3.7 и ее более современного варианта WRF, адаптированных к региону Черного моря. Модель хорошо зарекомендовала себя при оперативных прогнозах. С ее помощью удалось воспроизвести и описать структуру редкого явления — квазитропического циклона [6–8], а также структуру мезомасштабных вихрей [9].

Модель состоит из гидродинамического блока, содержащего уравнение Навье–Стокса с учетом силы Кориолиса, уравнение неразрывности, уравнение переноса тепла и уравнение состояния воздуха. К гидродинамическому блоку добавляются физические блоки,

зависящие от гидродинамических переменных и, в свою очередь, влияющие на них. Можно выделить шесть основных физических процессов, для каждого из которых выписываются дополнительные уравнения. Это перенос инфракрасного и видимого солнечного излучения, процесс формирования облачности и осадков, кучевая конвекция, турбулентные потоки импульса, тепла и влаги в атмосферном пограничном и приземном слоях, и перенос тепла и влаги в верхнем слое почвы.

Для расчета экстремальных осадков были выбраны параметризации физических процессов, используемые и проверенные четырехлетней практикой оперативного прогноза для региона Черного моря:

1. Для параметризации пограничного слоя выбрана схема Pleim–Xiu, в которой для случая неустойчивой стратификации пограничного слоя реализована нелокальная схема параметризации турбулентных потоков импульса, тепла и влаги.

2. Для параметризации кучевой конвекции использовалась схема Kain–Frisch-2, рассчитанная на масштабы меньше 30 км.

3. Для расчета переноса излучения в атмосфере применялась схема RRTM, в которой перенос инфракрасного излучения можно рассчитать с детальным распределением по частотам.

4. Для расчета фазовых переходов воды и льда и переноса гидрометеоров в облаках использовалась схема Graupel с несколькими формами льда и несколькими формами жидкой воды в облаках.

5. Для расчета потоков тепла и влаги на поверхности суши применялась пятислойная модель почвы с явным расчетом температуры и влажности почвы в верхнем слое толщиной 2 м.

Расчетная область атмосферной циркуляции в Крымском регионе была составлена из четырех телескопически вложенных доменов с последовательно возрастающим разрешением. Самый большой домен имеет разрешение 27 км и охватывает весь Черноморский регион. На границе этого домена ставятся граничные условия, взятые из анализа глобальной модели. Следующий домен с разрешением 9 км охватывает часть Черного моря (40–48° с. ш., 28–40° з. д.). Граничные условия для второго домена берутся из первого. Третий домен вложен в центр второго, имеет разрешение 3 км, охватывает почти весь Крымский полуостров (43,0–45,9° с. ш., 32,0–35,9° з. д.). Граничные условия для третьего домена берутся из второго домена. Наконец, четвертый домен с разрешением 1 км вложен в центр третьего, охватывает ту часть Крымского полуострова, в которой наблюдалось выпадение экстремальных осадков (44–45° с. ш., 33–35° з. д.).

В качестве начальных и граничных условий на боковых границах использовались данные глобальных моделей. Мы использовали результаты оперативного анализа и прогноза GDAS (Global Data Assimilation System)/GFS (Global Forecast System) за 2008–2010 гг. с разрешением  $0,5^\circ \times 0,5^\circ$ . Большую роль для атмосферной циркуляции, и особенно для глубокой кучевой конвекции в Крымском регионе, играет температура поверхности Черного моря. Здесь использовались результаты измерений температуры поверхности моря.

Выпадение экстремальных осадков — процесс скоротечный, поэтому расчет атмосферной циркуляции выполнялся на 1 сут, отступив на 12 ч от экстремума осадков.

Результатом расчета атмосферной циркуляции стали трехмерные массивы температуры и потенциальной температуры, геопотенциала, горизонтальной и вертикальной скорости, завихренности, потенциальной завихренности и дивергенции, относительной и удельной влажности, содержания воды в жидкой и твердой фазах в облаках, потоков излуче-



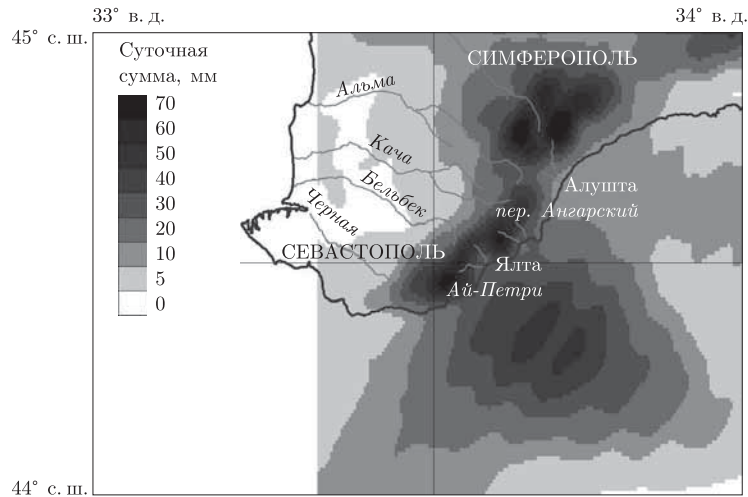


Рис. 1. Пространственное распределение суточных сумм осадков 22.09.08 г.

ния в видимом и инфракрасном диапазонах, вертикальных турбулентных потоков тепла и влаги.

Двухмерные массивы, характеризующие состояние атмосферы, — это потоки явного и скрытого тепла на поверхности, направленные вверх и вниз потоки солнечного и инфракрасного излучения на поверхности, температура и влажность на высоте 2 м, температура поверхности, температура и влажность почвы на пяти уровнях, давление на поверхности, давление на уровне моря, конвективные и внутримассовые осадки, облачность верхнего, среднего и нижнего ярусов, интегральное по высоте содержание воды в трех фазах, ветер на высоте 10 м, напряжение трения на поверхности, длина Монина–Обухова, толщина атмосферного пограничного слоя, тип атмосферного пограничного слоя.

При выборе синоптических ситуаций с экстремальными осадками и для валидации модельных оценок использовались архивы 22-х крымских метеостанций за 2005–2010 гг. После предварительного анализа были выбраны два эпизода с экстремальными осадками: 21–22 сентября 2008 г. и 23 октября 2006 г. (эти данные здесь не приводятся). 21–22 сентября 2008 г. отмечались сильные ливни в юго-восточной части Крыма. Например, на Ангарском перевале менее чем за 12 ч выпало более 80 мм осадков.

Для каждой из двух описанных выше синоптических ситуаций были выполнены расчеты атмосферной циркуляции. Трехмерные и двухмерные выходные массивы модели сохранялись с дискретностью 2 мин. Модельный ливень в Ялте продолжался с небольшими перерывами от 13 до 18 ч. За это время на водосборы рек Учан-Су и Дерекойка в разных местах водосборов выпало осадков 20–70 мм и более. Сравнение наблюдаемых осадков с модельными показало их хорошее совпадение. На рис. 1 показаны суточные суммы осадков, выпавших на рассматриваемый регион. После окончания ливня в Ялте подобный ливень начался в Алуште (водосборы рек Улу-Узень и Демерджи).

Следует заметить, что при расчете с высоким пространственным разрешением мгновенное расположение мезомасштабных конвективных областей с обильными осадками может несколько отличаться от реального. Причины такого несоответствия достаточно хорошо известны и связаны с уменьшением предсказуемости при увеличении пространственного разрешения. Нельзя ожидать точного и детального воспроизведения региональной моде-

лю расположения, размеров и формы каждого отдельного мезомасштабного конвективно-го образования.

В настоящее время предпринимаются попытки усвоения мезомасштабными моделями измерений, выполняемых метеорологическими радарными, которые измеряют трехмерное распределение осадков, воды и льда в облаках. Метеорадары обладают высоким разрешением, и поэтому усвоение их данных могло бы повысить предсказуемость мезомасштабных конвективных процессов.

**Гидравлическая модель.** Располагая данными о пространственно-временном распределении осадков, подадим их на вход гидравлической модели речного стока [5]. Будем оценивать сток на водосборах рек Ялты (Учан-Су, Дерекойка) и Алушты (Улу-Узень, Демерджи). Основой гидравлической модели стока служат данные о рельефе рассматриваемого региона с пространственным разрешением  $60 \times 90$  м [5].

Перенос воды из ячейки в ячейку в модели вычисляется по данным о направлениях потоков и коэффициентам релаксации поверхностного  $T_s(x, y, t)$ , подземного  $T_d(x, y, t)$  и руслового  $T_r(x, y, t)$  стоков.

Общий расход воды ( $\text{м}^3/\text{с}$ ), поступающей в каждую ячейку, состоит из суммы:

$$R_s + R_d + (P_w - E_w) + F_{in},$$

где  $R_s$  — сток с поверхности;  $R_d$  — подземный сток;  $(P_w - E_w)$  — осадки минус испарение с поверхности воды;  $F_{in}$  — приток из вышележащих ячеек.

В каждой ячейке одновременно вычисляются изменения объемов воды в трех условных бассейнах:  $V_s, V_d, V_r$  — поверхностном, подповерхностном и русловом, где суммируются потоки из соседних ячеек, плюс локальный поверхностный и подземный стоки, минус излишки после заполнения депрессий рельефа. Кроме метеоданных, использовались данные о типах землепользования с пространственным разрешением 1 км [10].

Следуя методике, описанной в [11], успешно применяемой, например, в модели SWAT (Soil and Water Assessment Tool, <http://swatmodel.tamu.edu/>), выпавшие осадки  $P(t)$  переводились в склоновый сток  $R(t)$  с помощью специального эмпирического коэффициента  $C_n$ , зависящего от инфильтрационных свойств почвы, растительного покрова, количества водонепроницаемых площадей и т. п.:

$$R = \frac{(P - I_a)^2}{(P - I_a) + S},$$

где  $R(t)$  — сток, мм;  $P(t)$  — осадки, мм;  $S(t)$  — влагоемкость почвы после начала стока, мм;  $I_a$  — начальный отбор, мм. При этом

$$I_a = 0,2S, \quad R = \frac{(P - 0,2S)^2}{P + 0,8S}, \quad S = \left( \frac{1000}{C_n} - 10 \right) \cdot 25,4.$$

При отладке модели кроме полей атмосферных осадков использовались композитные поля среднегодовых (а также среднемесячных) величин склонового стока из работы [12].

“Заполнение” водой с временным шагом в 12 с продолжалось до достижения русловыми стоками рек стационарного состояния, а именно, около 24-х модельных часов. Это время соответствует времени добегания воды от истоков рек Бельбек, Кача и Альма до моря. В результате получились значения расходов, хорошо соответствующие данным многолетних наблюдений.

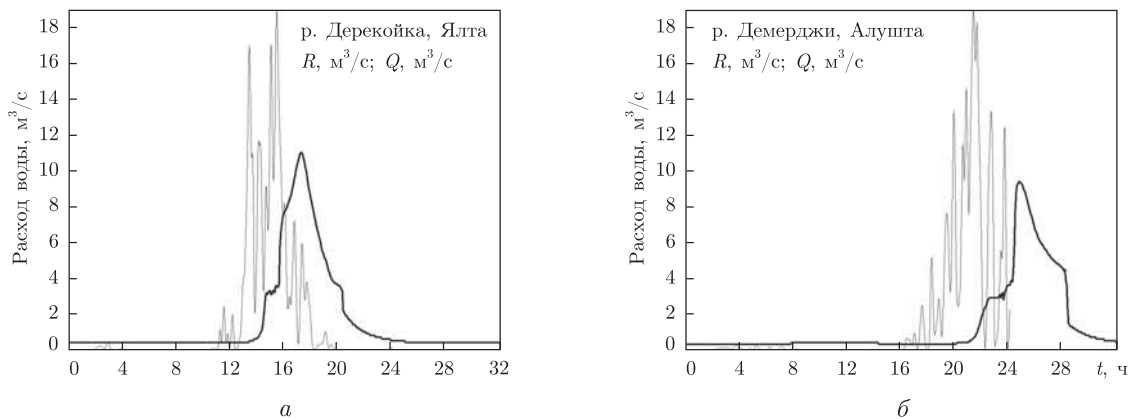


Рис. 2. Суммарный склоновый сток  $R(t)$  (тонкие кривые) и русловый сток  $Q(t)$  (жирные кривые) р. Деревкойка, Ялта, 22.09.08 г. (а) и р. Демерджи, Алушта, 22.09.08 г. (б)

Главными факторами, определяющими  $C_n$ , являются гидрологический тип почвы, тип подстилающей поверхности, обработка почвы, настоящие и предыдущие гидрологические условия. В США [13] принято в первом приближении разделять почвы на четыре группы, в зависимости от их скорости инфильтрации. Учет влияния карстовых образований на поверхностный сток строился на основе новых данных районирования карста Крыма [14].

На рис. 2, а показан временной ход суммарного склонового  $R(t)$ ,  $\text{м}^3/\text{с}$  и руслового  $Q(t)$ ,  $\text{м}^3/\text{с}$  стоков р. Деревкойка в районе ее устья (Ялта). Ливень на водосборе этой реки, а также второй реки ялтинского региона — Учан-Су (не приводится), начался после полудня в сопровождении южных ветров. Из рис. 2, а видно, как водосбор сглаживает быстро меняющуюся картину суммарного склонового стока водосбора р. Деревкойка. При этом временная задержка расхода  $Q(t)$  относительно  $R(t)$  составляет около 4 ч, что соответствует времени стекания по склонам, выпавших атмосферных осадков (около 0,5 ч), плюс время добегания воды по руслу ( $\sim 3,5$  ч). Максимальный расход р. Деревкойка составил  $11 \text{ м}^3/\text{с}$  (для р. Учан-Су  $\sim 7 \text{ м}^3/\text{с}$ ). Такие значения расходов  $Q(t)$  можно назвать экстремальными, но не катастрофическими. Напомним, что среднегодовые расходы рек Деревкойка и Учан-Су составляют около 0,3 и  $0,5 \text{ м}^3/\text{с}$ .

Через 8 ч похожая модельная картина (рис. 2, б) наблюдалась на водосборах рек Алушты: Демерджи и Улу-Узень. За эти 8 ч ветер поменял направление на северное. В регионе Алушты начался второй сильнейший ливень (выпала месячная норма осадков за 10–12 ч). При этом максимальные расходы  $Q(t)$  составили на р. Демерджи  $9 \text{ м}^3/\text{с}$ , а на р. Улу-Узень — около  $3 \text{ м}^3/\text{с}$ . Заметим, что на более крупных реках севастопольского региона — Черная, Бельбек, Кача и Альма в рассматриваемом случае ничего экстремального не произошло, что полностью соответствует картине пространственного распределения осадков на рис. 1.

Таким образом, расчеты на основе мезомасштабной модели атмосферной циркуляции и гидравлической модели речного стока дают удовлетворительные оценки экстремальных ливневых паводков в регионе ЮБК. Полученные результаты можно рассматривать как первый шаг к решению задачи краткосрочного прогноза катастрофических паводков и селей в этом регионе.

1. Олиферов А. Н., Тимченко З. В. Реки и озера Крыма. — Симферополь: Доля, 2005. — 214 с.
2. Клюклин А. А. Экстремальные проявления неблагоприятных и опасных экзогенных процессов в XX веке в Крыму // Геополитика и экогеодинамика регионов. — 2005. — Вып. 1. — С. 27–38.

3. *Dudhia J.* A non hydrostatic version of the Penn State-NCAR mesoscale model: Validation tests and simulation of an Atlantic cyclone and cold front // *Mon. Wea. Rev.* – 1993. – **121**. – P. 1493–1513.
4. *Skamarock W. C., Klemp J. B., Dudhia J. et al.* A description of the Advanced Research WRF Version 3. NCAR/TN – 475=STR; NCAR Technical Note, Mesoscale and Microscale Meteorology Division, National Center of Atmospheric Research. – June 2008. – 125 p.
5. *Иванов В. А., Прусов А. В.* Речной сток юга Украины: количественные оценки паводков, принципы управления и прогноз. – Севастополь: ЭКОСИ-Гидрофизика, 2006. – 232 с.
6. *Яровая Д. А., Ефимов В. В., Шокуров М. В. и др.* Квазитропический циклон над Черным морем: наблюдение и численное моделирование // *Мор. гидрофиз. журн.* – 2008. – № 3. – С. 41–55.
7. *Ефимов В. В., Шокуров М. В., Яровая Д. А.* Численное моделирование квазитропического циклона над Черным морем // *Изв. РАН. Физика атмосферы и океана.* – 2007. – **43**, № 6. – С. 667–686.
8. *Ефимов В. В., Станичний С. В., Шокуров М. В. и др.* Наблюдение квазитропического циклона над Черным морем // *Метеорология и гидрология.* – 2008. – № 4. – С. 53–62.
9. *Ефимов В. В., Шокуров М. В., Яровая Д. А. и др.* Статистика мезомасштабных циклонических вихрей над Черным морем // *Мор. гидрофиз. журн.* – 2009. – № 4. – С. 19–33.
10. *Masson V., Chauvin J.-L., Chauvin F. et al.* Global database of land surface parameters at 1 km resolution in meteorological and climate models // *J. Climate.* – 2003. – **16**, No 9. – P. 1261–1282.
11. *Urban Hydrology for Small WaterSheds* // US Department of Agriculture, Natural Resources Conservation Service, Conservation Engineering Division. – Technical Release 55. – 1986. – 152 p.
12. *Fekete B. M., Vörösmarty C. J., Grabs W.* Global Composite Runoff Fields Based on Observed River Discharge and Simulated Water Balances. – Koblenz, Germany: WMO-Global Runoff Data Centre, Report #22, 1999. – 109 p.
13. *Brakensiek D. L., Rawls W. J.* Green-Ampt infiltration model parameters for hydrologic classification of soils // John Borrelli, Victor R. Hasfurther, and Robert D. Burman (ed.) *Advances in irrigation and drainage surviving external pressures* // *Proceedings of Am. Soc. Civ. Eng. specialty conference.* – New York, 1983. – P. 226–233.
14. *Вахрушев Б. А.* Районирование карста Крымского полуострова // *Спелеология и карстология.* – 2009. – № 3. – С. 39–46.

*Морской гидрофизический институт  
НАН Украины, Севастополь*

*Поступило в редакцию 06.02.2012*

**Академік НАН України В. О. Іванов, І. А. Овчаренко, О. В. Прусов,  
М. В. Шокуров**

### **Моделювання катастрофічних паводків в регіоні Південного берега Криму**

*На основі послідовного застосування регіональної моделі атмосферної циркуляції і гідравлічної моделі річкового стоку відновлена картина розвитку екстремальних зливових паводків на малих річках севастопольського регіону та Південного берега Криму. Отримані результати можна розглядати як перший крок на шляху короткострокового прогнозування несприятливих і небезпечних процесів в Криму – паводків і селів.*

**Academician of the NAS of Ukraine V. A. Ivanov, I. A. Ovcharenko, A. V. Prusov,  
M. V. Shokurov**

### **Modeling of extreme flood flows on the south coast of the Crimea**

*Using the regional atmospheric circulation and hydraulic river flow models, we are able to predict an extreme flood flow in the small rivers of the Sevastopol region and the South Coast of the Crimea. The results can be used to produce the short-term forecasts of floods and torrents in the Crimea region.*

В. П. Семененко, А. Л. Гіріч, Н. В. Кичань

**Тонкозернистий ксеноліт AL1 у хондриті Allende (CV3): мінералогія та походження***(Представлено академіком НАН України Е. В. Соболевичем)*

*Наведено результати структурно-мінералогічних та хімічних досліджень тонкозернистого силікатного ксеноліта AL1 у хондриті Allende (CV3). За валовим хімічним складом і відношенням SiO<sub>2</sub>/MgO ксеноліт відноситься до вуглистих хондритів. Зменшений вміст високотемпературних мінералів, металу й сульфїду, а відповідно Ca, Al, Ti й Ni у валовому хімічному складі є основною характеристикою, за якою ксеноліт відрізняється від хондрита в цілому, його матриці та темних включень. Припускається належність ксеноліта до проторечовини хондр і матриці метеорита. Наявність пористих тонкозернистих ксенолітів у хондритах є ще одним доказом існування в поясі астероїдів крихких об'єктів, фізичні властивості яких не дозволяють самотійно проникнути через атмосферу і приземлятися у вигляді метеоритів.*

Мексиканський хондрит Allende, який випав у 1969 р. у вигляді кам'яного дощу загальною масою понад 2 т [1], є одним із найбільш вивчених метеоритів. Повнота його вивчення зумовлена як належністю до вуглистих хондритів (в яких збереглися прикмети ранніх фізико-хімічних процесів у протопланетній туманності), так і доступністю зразків для дослідження. Досить відзначити, що для визначення загального хімічного складу хондрита було використано безпрецедентно велику для метеоритів масу — 4 кг [2]. Дослідження мінералогічних, хімічних та ізотопних характеристик метеорита [3] на сучасному інструментальному ґрунті сприяло новим знахідкам та доскональному вивченню високотемпературних конденсатів [4], зокрема збагачених на Ca, Al й Ti мінералів, фрейдлінгів і амебоподібного олівїну. У тонкозернистій фракції хондрита було діагностовано органічну речовину [5] та досонячні зерна мінералів [6]. Згідно з результатами досліджень, метеорит Allende було класифіковано як вуглистий хондрит CV3, тобто як гетерогенний агломерат високо- й низькотемпературних фракцій сонячної речовини з незначним вмістом досонячних зерен мінералів [1, 3]. У доземний період хондрит був частково зміненим процесами термального, ударного та водного метаморфізму [1, 3].

У матриці метеорита знайдено темні тонкозернисті включення, які за хімічним складом подібні до основної частини, але відмінні за структурою [1, 7–10], що свідчить про належність хондрита Allende до геноміктових брекчій [3]. При цьому слід відзначити, що до “темних” включень, які діагностують також як фрагменти або ксеноліти [8], було віднесено об'єкти, колір яких змінюється від світло-сірих до чорних. З нашої точки зору таке визначення є некоректним, оскільки темно-сірий колір є фоновим кольором метеорита. У даному повідомленні представлено результати досліджень сірого ксеноліта AL1.

**Об'єкти та методи досліджень.** Силікатний ксеноліт AL1 розміром 1,2 × 0,8 см має овальну форму і прихованокристалічну будову, був знайдений на відколі фрагментованого зразка, що зберігається в Комітеті по метеоритах НАН України. З ксеноліта відібрали незначні за розміром уламки, а з фрагмента метеорита Allende, який містить ксеноліт, виготовляли полірований шліф.

Структурно-мінералогічні характеристики вивчено під оптичним мікроскопом марки ПОЛАМ Р-312, а також за допомогою сканувальних електронних мікроскопів — марки JSM-6490LV (обладнаний енергодисперсійним спектрометром (EDS) INCA Penta FET×3) та марки JSM-6060LA фірми Jeol. Хімічний склад зерен мінералів визначено за допомогою мікроаналізатора марки JXA-8200 фірми Jeol в Техцентрі НАН України при силі струму 10 нА, прискорювальній напрузі 15 кВ, діаметрі зонда 2 мкм з використанням ZAF поправок. У зв'язку з високою пористістю олівіну і Са-піроксену в хондрах ксеноліта прецизійні дані за їх хімічним складом отримано лише для одного зерна олівіну. Валовий хімічний склад ксеноліта встановлено розфокусованим зондом (діаметр 20 мкм) як середнє з 436 вимірів.

**Будова ксеноліта.** Згідно з електронно-мікроскопічними дослідженнями, поверхня відколів однорідно-зерниста, пориста, розмір пор  $\leq 2$  мкм (рис. 1, *a*). Ксеноліт складається переважно з дрібних силікатних зерен, пористих агрегатів округлих і неправильних за формою субмікронних зерен, а також окремих крупних зерен і кристалів призматичного або таблитчастого габітусу. Важливою морфологічною ознакою пористих агрегатів є їх акреційна будова, яка сформувалась внаслідок злипання субмікронних і нанометричних зерен. Особливо це характерно для металу і пентландиту (див. *b* на рис. 1). Окремі ділянки ксеноліта аморфізовані, тобто покриті тонким шаром силікатного скла. На призматичних гранях крупних кристалів олівіну й піроксену спостерігаються деформації зсуву по спайності мінералів, а на поверхні зерен — одиничні високотемпературні бризки розплаву, нанометричні пори і включення. В одній з великих пор силікатного агрегату, стінки якої покриті плагіоклазовим склом, діагностовано систему паралельних ниткоподібних кристалів Са-збагаченого піроксену з потовщеними вершинними формами (див. *в* на рис. 1).

У полірованому шліфі ксеноліт має типову для тонкозернистої речовини хондритів будову (див. *г* на рис. 1) і (відповідно до розмірів зерен) складається з трьох головних компонентів: домінуючих пористих прихованокристалічних ( $\leq 1$  мкм), тонкозернистих ( $\leq 5$  мкм), а також окремих крупних зерен ( $\geq 5$  мкм) силікатів (див. *д* на рис. 1) і металосульфідних агрегатів. Серед тонкозернистої речовини зафіксовано одиничні погано видимі силікатні хондри розміром  $\leq 500$  мкм та амебоподібні пористі зерна олівіну. Хондри мають округлу форму, кристалічну або мікропорфірову будову, характеризуються підвищеною пористістю, іноді наявністю тоненької оболонки із субмікронних металосульфідних зерен. Отримані результати повністю відповідають даним про компонентний склад і будову відколів ксеноліта, а також свідчать про високий вміст субмікронних твердих включень в окремих зернах мінералів.

Цікаво відзначити таке: після фрагментації, виготовлення і трирічного зберігання шліфа в лабораторних умовах на його поверхні виросли численні голчасті кристали гетиту (див. *е* на рис. 1). Особливо активний ріст відбувся в ксеноліті, що свідчить про агресивність земного середовища щодо примітивної пористої речовини нерівноважних хондритів.

**Мінеральний склад ксеноліта** в порівнянні з хондритом Allende досить обмежений і представлений в основному силікатами з чітким домінуванням олівіну над піроксеном, другорядними аваруїтом і пентландитом. Як акцесорні мінерали відзначали: нефелін, хроміт, ільменіт та апатит в одній із хондр. На відміну від окремих крупних кристалів олівіну і піроксену, всі зерна мінералів мають неправильну або округлу форму. Найбільший ступінь ксеноморфізму зерен спостерігається в аваруїті і пентландиті. Переважна більшість металосульфідних асоціацій представлена видовженими агрегатами субмікронних зерен і характеризується субпаралельним розташуванням у тонкозернистій речовині ксеноліта. Хімічний

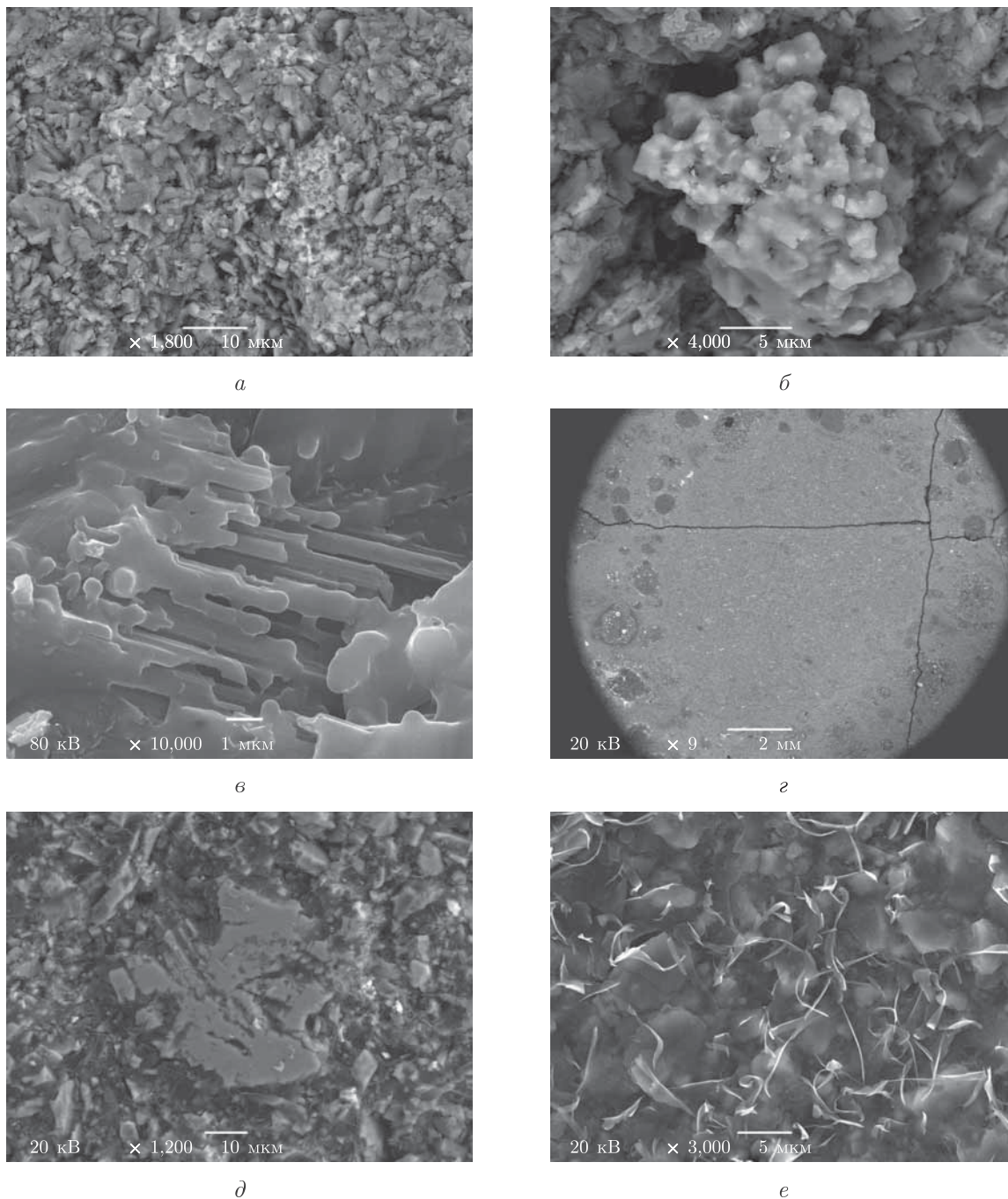


Рис. 1. СЕМ-зображення у відбитих і вторинних (e) електронах поверхні зламу (a–e) та полірованого шліфа (z–e) ксеноліта AL1 хондрита Allende:

a — тонкозерниста будова силікатного ксеноліта; б — акреційний пористий агрегат нанометричних зерен пентландиту в силікатній речовині; в — нитковидні кристали Са-піроксену в одній із пор, стінки якої покриті силікатним склом; z — чітко видима відмінність у будові ксеноліта та метеорита, що його вміщає (білі зерна — метал і сульфід; тріщини є результатом поліровки метеорита); d — крупне зерно олівіну в тонкозернистій речовині ксеноліта; e — мікронні кристали гетиту, які вирости переважно на тонкозернистій речовині ксеноліта внаслідок земного вивітрювання

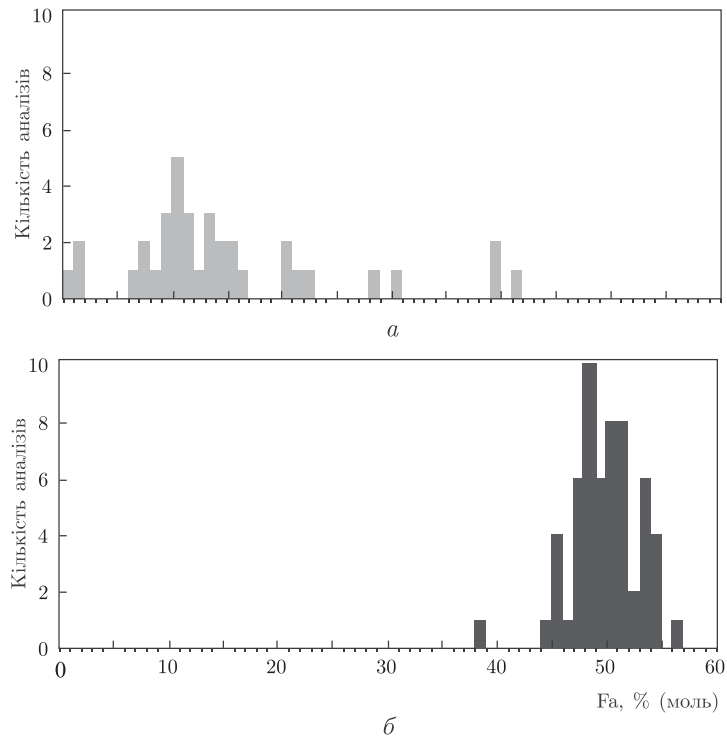


Рис. 2. Гістограма вмісту фаялітового компонента в олівині ксеноліта AL1 (а) та матриці хондрита Allende (б)

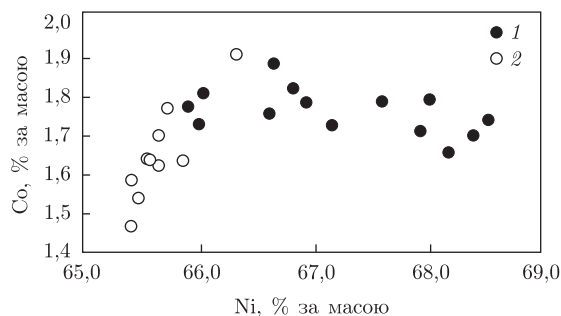


Рис. 3. Вміст Ni й Co в аваруйті ксеноліта AL1 та матриці хондрита Allende: 1 — ксеноліт; 2 — матриця

склад усіх мінералів змінюється від зерна до зерна, а також у межах зерен, що є типовим для мінералів, переповнених нанометричними включеннями.

Олівін характеризується варіацією мольного вмісту фаялітового компонента (Fa) від майже чистого форстериту до олівину з 41% Fa (рис. 2). Середній склад зерен у тонкозернистій речовині ксеноліта відповідає  $Fa_{15}$ , тобто вказує на домінування високотемпературного олівину. Склад одного із зерен олівину в хондрі відповідає  $Fa_{18,9}$ . Піроксен представлений лише Ca-збагаченими високотемпературними відмінами —  $Fs_{1,26-6,94}En_{50,0-66,1}Wo_{38-43}$ .

Хімічний склад аваруйту характеризується тенденцією до зворотної кореляції вмісту Ni й Co (рис. 3). У метали спостерігаються домішки Cr й Cu. У більшості випадків метал асоціює з пентландитом, масовий вміст Ni в якому змінюється від 17,5 до 21,9%, а Co — від 0,71 до 1,02%. На відміну від хондрита Allende, в ксеноліті не було знайдено троїліту.



Зерна нефеліну досить рідкісні, асоціюють з олівіном, середній хімічний склад по двох аналізах відповідає, % за масою: 35,1 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; 47,6 SiO<sub>2</sub>; 14,2 Na<sub>2</sub>O; 1,34 FeO; 0,76 CaO; 0,68 K<sub>2</sub>O; 0,18 MgO; 0,05 Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> і 0,03 P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. Одиначні зерна ільменіту й хроміту діагностовано в силікатній речовині ксеноліта, а апатиту — в хондрі, але їх мікронні розміри не дозволили коректно визначити хімічний склад.

**Валовий хімічний склад ксеноліта** характеризується систематично низькою аналітичною сумою, що є типовим для тонкозернистої пористої речовини примітивних хондритів, низьким вмістом S, Ni, а також низьким співвідношенням FeO/(FeO + MgO) (табл. 1). Високий стандарт відхилення від середніх значень для Mg, Al, Ca, Fe й Si вказує на хімічну і мінералогічну неоднорідність ксеноліта на рівні 20 мкм електронного зонда. За співвідношенням SiO<sub>2</sub>/MgO (1,37) ксеноліт відповідає вуглистим хондритам (1,42 ± 0,05) [11].

**Прикмети ударного метаморфізму.** Крім субпаралельного розташування метало-сульфідних агрегатів, що є макроскопічною ознакою проходження ударної хвилі, в ксеноліті присутні окремі структури ударного метаморфізму, які діагностуються лише на електронно-мікроскопічному рівні. Вони представлені переважно скульптурами деформації і плавлення (бризки розплаву, аморфізація стінок пор і тонкозернистих агрегатів). Наявність в одній з аморфізованих пор ниткоподібних кристалів Са-піроксену (див. в на рис. 1) однозначно свідчить про їх швидкий ріст у нерівноважних *PT*-умовах, найімовірніше внаслідок ударного метаморфізму в постагломераційний період материнського тіла хондрита Allende.

**Природа ксеноліта.** Для з'ясування природи ксеноліта необхідно порівняти його структурно-мінералогічні особливості з хондритом Allende в цілому, матрицею, а також з літичними включеннями. Від основної частини хондрита [1–3, 10] він відрізняється такими характеристиками: 1) сірим кольором; 2) однорідною тонкозернистою будовою; 3) низьким

Таблиця 1. Валовий хімічний склад ксеноліта AL1 та текстурних складових вуглистого хондрита Allende, % за масою

Компонент	AL1 (кількість аналізів 436)	Хондрит Allende [2]	Матриця хондрита [1]	Темні включення хондрита				
				за [1]	4294 [9]	4301 [9]	4320 [9]	4314 [9]
SiO <sub>2</sub>	33,73	34,20	33,09	33,22	34,43	33,83	34,01	33,25
TiO <sub>2</sub>	0,04	0,15	0,13	0,13	0,12	0,12	0,12	0,10
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2,88	3,27	3,07	2,54	2,75	2,81	2,70	2,26
Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0,25	0,53	0,55	0,56	0,50	0,52	0,50	0,53
MgO	24,68	24,53	21,41	23,77	24,04	24,18	24,45	23,87
FeO	34,11	30,25	34,15	32,88	33,02	34,34	33,42	35,05
MnO	0,27	0,19	0,22	0,26	0,26	0,26	0,26	0,34
CaO	1,68	2,57	2,67	2,98	2,72	2,15	2,58	2,48
Na <sub>2</sub> O	0,17	0,46	0,44	0,34	0,37	0,13	0,18	0,09
K <sub>2</sub> O	0,01	0,04	0,03	0,01	0,03	0,01	0,01	0,01
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0,38	0,24	0,25	0,31	0,32	0,35	0,32	0,34
Елемент:								
Ni	1,31	1,42	1,53	1,45	1,44	1,30	1,44	1,67
Co	0,06	0,06	0,08	0,04	—	—	—	—
S	0,42	2,09	2,40	1,52	—	—	—	—
Сума	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00
Сума аналітична	81,48	100,24	100,07	100,61	97,62	96,85	98,05	95,90
FeO/(FeO+MgO)	0,58	0,55	0,61	0,58	0,58	0,59	0,58	0,59
SiO <sub>2</sub> /MgO	1,37	1,39	1,55	1,40	1,43	1,40	1,39	1,39

Примітка. Дані валового хімічного складу перераховано на 100%.

вмістом хондр і меншими їх розмірами; 4) меншою кількістю мінералів, зокрема відсутністю троїлиту й агрегатів Ca-, Al-збагачених мінералів, що зумовило помітне збіднення його тугоплавкими елементами — Ca, Ti, Al, меншим вмістом нікелевого заліза і пентландиту, а відповідно Ni й S у валовому хімічному складі (див. табл. 1); 5) більш активним земним вивітрюванням, що зумовлено його тонкозернистою будовою і підвищеною пористістю.

За структурою вивчений ксеноліт подібний до матриці хондрита Allende, але частково відрізняється за мінеральним і хімічним складом [1, 3, 12]. Збіднення ксеноліта металом і сульфідом, а також обмежена кількість високотемпературних мінералів обумовили відмінності в хімічному складі (див. табл. 1), а саме: нижчі концентрації S, Ca, Ti та злегка Al й Ni. На відміну від матриці ксеноліт характеризується більшою хімічною неоднорідністю олівіну й аваруїту, що вказує на нижчий ступінь метаморфізму. Середній хімічний склад мінералів також відмінний. Так, нижчий вміст Fe в олівіні ксеноліта (див. рис. 2) зумовлений нижчим ступенем окиснення силікатів імовірно ще в доагломераційний період, а в аваруїті (див. рис. 3) — значним виносом Fe внаслідок вивітрювання на Землі, що підтверджується також відсутністю прямої кореляції Co/Ni у металі. Відповідно співвідношення FeO/(FeO+MgO) ксеноліт є дещо менш окисненим, ніж матриця хондрита (див. табл. 1). Крім того, відмінність у відношенні SiO<sub>2</sub>/MgO вказує на різні хімічні типи речовини, тобто про належність ксеноліта, як і метеорита в цілому, до вуглистих хондритів, а матриці — до звичайних.

За структурою, мінеральним і валовим хімічним складом ксеноліт найбільш близький до темних включень хондрита Allende [1, 7–10], але також відрізняється збідненням високотемпературними мінералами, металом і сульфідом (див. табл. 1), що є його мінералого-хімічною особливістю.

Порівняння ксеноліта AL1 з хондритом Allende та його складовими дає змогу зробити припущення про їх генетичний зв'язок. Не виключено, що тонкозерниста речовина ксеноліта є проторечовиною, тобто акреційним реліктом пилової компоненти протопланетної туманності, з якої внаслідок багатостадійних і поліхронних процесів фізико-хімічної трансформації утворилися хондри і матриця метеорита. Як окрема текстурна складова, ксеноліт виник раніше, ніж материнське тіло хондрита Allende. На відміну від останнього, він утворився в газопиловому середовищі, яке в основному було збіднене металосульфідним і високотемпературним мінеральним пилом, а також хондрами. Ця відмінність може мати як хронологічний, так і просторовий характер. Хоча речовина хондрита Allende має більш складну доземну історію, ніж речовина ксеноліта AL1, їх хімічна спорідненість підтверджує висновок попередніх досліджень про належність метеорита до геноміктових брекчій [3].

Великі розміри ксенолітів хондрита Allende, їх пористість, а також підвищена крихкість є ще одним аргументом на користь нашого припущення [13] про існування в поясі астероїдів силікатних об'єктів, фізичні характеристики яких не дозволяють проникнути через атмосферу і потрапити на Землю у вигляді окремих метеоритів. Можливо, саме з такими тілами і пов'язаний Тунгуський феномен, який характеризується потужною ударною хвилею та відсутністю вагомих речовинних залишків в районі падіння. Політ і фрагментація в атмосфері Землі високопористих тонкозернистих тіл здатні спровокувати потужну ударну хвилю і, як наслідок, — розсіяння на великій площі субмікронних і нанометричних силікатних зерен, які, на жаль, неможливо ні фізично, ні хімічно відокремити від їх земних аналогів. До речі, вивчення спектрів відбиття поверхні астероїдів [14] також вказує на існування в поясі астероїдів не лише материнських тіл метеоритів, а й невідомих раніше лігичних об'єктів.

1. *Clarke R. S., Jarosewich E., Mason B. et al.* The Allende, Mexico, meteorite shower // *Smithsonian Contributions Earth Sci.* – 1970. – No 5. – P. 1–53.
2. *Jarosewich E., Clarke R. S., Barrows J. N.* The Allende meteorite reference sample // *Ibid.* – 1987. – No 27. – P. 1–49.
3. *Додд Р. Т.* Метеориты: Петрология и геохимия. – Москва: Мир, 1986. – 384 с.
4. *MacPherson G. J.* Calcium-Aluminum-rich inclusions in chondritic meteorites // *Treatise on Geochemistry* / Ed. H.D. Holland and K.K. Turekian. – London: Elsevier, 2004. – Vol. 1. – P. 201–246.
5. *Gilmour I.* Structural and isotopic analysis of organic matter in carbonaceous chondrites // *Treatise on Geochemistry* / Ed. H.D. Holland and K.K. Turekian. – London: Elsevier, 2004. – Vol. 1. – P. 269–290.
6. *Huss G. R., Lewis R. S.* Presolar diamond, SiC, and graphite in primitive chondrites: Abundances as a function of meteorite class and petrologic type // *Geochim. Cosmochim. A.* – 1995. – **59**. – P. 115–160.
7. *Bischoff A., Palme H., Spettel B. et al.* The chemical composition of dark inclusions from the Allende meteorite (abstract) // *Lunar Planet. Sci. Conf.*, 19th, Houston, TX, March 14–18, 1988. – Houston, 1988. – P. 88–89.
8. *Fruland R. M., King E. A., McKay D. S.* Allende dark inclusions // *Proc. Lunar Planet. Sci. Conf.*, 9th, Houston, Tex., March 13–17, 1978. – Houston, 1978. – P. 1305–1329.
9. *Johnson C. A., Prinz M., Weisberg M. K. et al.* Dark inclusions in Allende, Leoville, and Vigarano: Evidence for nebular oxidation of CV3 constituents // *Geochim. Cosmochim. A.* – 1990. – **54**. – P. 819–830.
10. *McSween H. Y.* Petrographic variations among carbonaceous chondrites of the Vigarano type // *Ibid.* – 1977. – **41**. – P. 1777–1790.
11. *Van Schmus W. R., Wood J. A.* A chemical-petrologic classification for the chondritic meteorites // *Geochim. Cosmochim. A.* – 1967. – **31**. – P. 745–765.
12. *Krot A. N., Scott E. R. D., Zolensky M. E.* Mineralogical and chemical modification of components in CV3 chondrites: Nebular or asteroidal processing? // *Meteoritics.* – 1995. – **30**. – P. 748–775.
13. *Семененко В. П., Шаркин О. П., Гирич А. Л.* Высокопористые фрагменты в хондрите Саратов (L4) // *Геохимия.* – 1992. – No 6. – С. 881–892.
14. *Бельська І. М.* Оптичні властивості поверхонь астероїдів, кентаврів та тіл поясу Койпера: Автореф. дис. ... д-ра фіз.-мат. наук / Голов. астроном. обсерваторія. – Київ, 2007. – 30 с.

ДУ “Інститут геохімії навколишнього середовища НАН України”, Київ

Надійшло до редакції 29.11.2011

**В. П. Семененко, А. Л. Гирич, Н. В. Кичань**

### **Тонкозернистый ксенолит AL1 в хондрите Allende (CV3): минералогия и происхождение**

*Приведены результаты структурно-минералогических и химических исследований тонкозернистого силикатного ксенолита AL1 в хондрите Allende (CV3). По валовому химическому составу и отношению SiO<sub>2</sub>/MgO ксенолит относится к углистым хондритам. Пониженное содержание высокотемпературных минералов, металла и сульфида, а соответственно Ca, Al, Ti и Ni в валовом химическом составе является основной характеристикой, по которой ксенолит отличается от хондрита в целом, его матрицы и темных включений. Допускается принадлежность ксенолита к протовеществу хондр и матрицы метеорита. Наличие пористых тонкозернистых ксенолитов в хондритах является еще одним доказательством существования в поясе астероидов хрупких объектов, физические свойства которых не позволяют самостоятельно проникнуть через атмосферу и приземлиться в виде метеоритов.*

V. P. Semenenko, A. L. Girich, N. V. Kychan

### **Fine-grained xenolith AL1 in chondrite Allende (CV3): mineralogy and origin**

*The results of structural, mineralogical and chemical studies of fine-grained silicate xenolith AL1 of chondrite Allende (CV3) are given. A bulk chemical composition and the ratio  $\text{SiO}_2/\text{MgO}$  allow us to refer the xenolith to carbonaceous chondrites. A low content of high-temperature minerals, metal, and sulfide, and accordingly Ca, Al, Ti and Ni in the bulk chemical composition is the main characteristic, which distinguishes the xenolith from the chondrite in total, its matrix, and dark inclusions. The belonging of the xenolith to a precursor of chondrules and to a matrix of the meteorite is supposed. The presence of porous fine-grained xenoliths in chondrites is the additional evidence of the existence in the asteroid belt of fragile objects, whose physical properties do not allow them to penetrate through the atmosphere and to land as meteorites.*

## Умови метаморфізму та гранітизації порід Українського щита

(Представлено академіком НАН України В. І. Старостенком)

*Розглянуто умови метаморфізму докембрійських порід Українського щита. Зроблено висновки, що інтенсивність перетворень залежить від тиску, температури, кількості та складу привнесеної речовини. Усі ці параметри безпосередньо пов'язані з відстанню до астеносфери, кривля якої розміщується на глибині 20 км. Розплави корової астеносфери можуть виникнути виключно за рахунок надходження речовини з мантії.*

Розгляд умов метаморфізму та гранітизації докембрійських порід є важливим за кількох причин. По-перше, широко поширена думка, що палеогеотермічний градієнт в докембрії істотно відрізнявся від фанерозойського та сучасного. Вважається, що саме підвищений геотермічний градієнт є причиною появи гранітоїдів внаслідок анатектичного плавлення. По-друге, до останнього часу поширена точка зору, що ступінь метаморфізму та вік утворення порід є параметрами, пов'язаними між собою: чим вищий ступінь метаморфізму — тим старші породи.

Регіональний метаморфізм — змінення під впливом тиску та температури при зануренні шару порід на глибину. На сьогодні визначено  $PT$ -умови перетворення для багатьох зразків порід УЩ [1]. Температури метаморфізованих порід до глибини 18 км розміщено вздовж прямої, глибше діапазон температур досягає 150 °С на одному рівні (рис. 1). Значно вищі температури на глибині 0–20 км фіксують тільки гідротермальні утворення, що відкладаються з флюїдів, які відокремлюються від корової астеносфери та інтрузій. На глибині 20 км середні температури перевищують температуру солідусу порід амфіболітової фації (600 °С), тому породи, що за складом відповідають граніту — андезиту, плавляться. Для плавлення ультраосновних та основних порід потрібні значно вищі температури (1050 °С

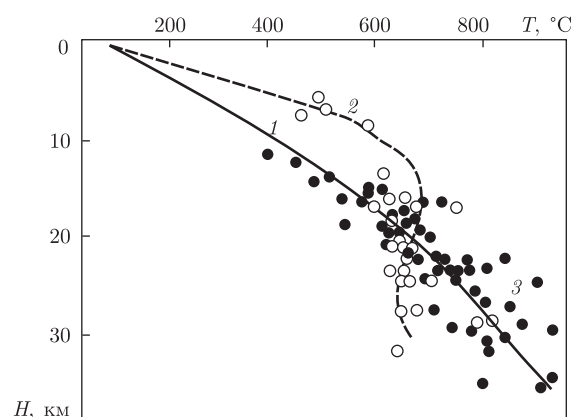


Рис. 1.  $PT$ -умови регіонального метаморфізму в корі УЩ (1), розрахунок температур при гідротермальній активності (2) та встановлені для Приазовського масиву (3) [1, 4]

і більше) у діапазоні корових глибин. Тому вони частково зберігаються навіть у коровому осередку у вигляді ксенолітів, розмір яких може варіювати від кількох сантиметрів до кількох кілометрів. Температури метаморфічних перетворень подібних порід УЩ можуть перевищувати 800 °С. Глибше 20 км — діапазон температур метаморфічних перетворень значно ширший, що пояснюється впливом на частину зразків високотемпературних ( $T > 1000$  °С) мантийних розплавів. Зразки, які подібного впливу не відчували, демонструють відносно низькі температури перетворень при високому тиску.

Існують петрологічні моделі, які пояснюють утворення тоналіт-трондьємітових асоціацій внаслідок плавлення за рахунок високого палеогеотермічного градієнта в археї [2]. Для утворення розплаву, що за складом відповідає тоналіту, необхідні температури близько 1100–1200 °С при тиску 0,6–0,8 ГПа. Реалізація подібного розподілу температур призвела б до перевищення температури солідусу аж до поверхні, тобто тотального плавлення кори. Більш вірогідним є припущення, що розігріта речовина надходить під кору та в кору, де охолоджується. Ця гіпотеза пояснює як високі температури архейських магм, так і існування “твердої” кори вище 20 км.

Розподіл температур з глибиною демонструє, що метаморфічні перетворення відбуваються в періоди існування корової астеносфери. Тоді регіональний метаморфізм для порід, розташованих на глибині, що перевищує 15 км, скоріше відповідає плутонометаморфізму. Різницею є розміри плутону, за який виступає корова астеносфера, а також посилення впливу речовини, що від неї відокремлюється, на мінерали літосфери за рахунок високої температури та тиску. Наявність близько розташованої корової астеносфери призводить до того, що у міру занурення до метаморфічної додається метасоматична складова — зміна складу мінералів та порід, що супроводжується привнесенням речовини. За *PT*-умов високої амфіболітової фації та участі флюїду породи можуть бути частково розплавлені та замінені — формуються мігматити, а при підвищенні до притаманних гранулітової фації — розплавлені з утворенням гранітоїдів. Інтенсивність перетворень залежить від основності порід — вмісту кремнезему та глинозему.

Для багатьох геоблоків щита породи були перетворені кілька разів. Між перетвореннями відбувалися вертикальні рухи. Якщо після впливу метасоматизуючого флюїду за високих *PT*-умов порода була виведена на поверхню внаслідок висхідних рухів та більше не підлягала впливу розігрітої речовини, вона зберегла наслідки впливу *PT*-умов одного етапу, наприклад, на Середньопридніпровському мегаблоці Українського щита. Якщо після подальшого відбулися зміни за менших *PT*-умов, вона може зберігати інформацію про кілька моментів їхнього впливу. В цьому разі проявлений також регресивний етап метаморфізму. Якщо відбувалося кількаразове занурення, породи раз за разом підлягали впливу більших температури та тиску, вони представлені мігматитами, що утворилися поблизу астеносфери, або палінгенними гранітами, що сформувалися безпосередньо в шарі плавлення. Серед палінгенних гранітів зберігаються різного розміру ксеноліти ультраосновних порід, що мають старший вік (наприклад, ультрабазити капітанівського комплексу в Голованівській шовній зоні). Доказом наявності кількох етапів перетворень може слугувати різний абсолютний вік утворення ядра циркону та його краю. Подібні циркони розповсюджені на Побужжі.

Таким чином, вік породи та ступінь її перетворення — характеристики, що не мають між собою причинного зв'язку. Відмінність будови докембрійських щитів від фанерозойських активних регіонів обумовлена високим ступенем метаморфізму порід, що виходять на денну поверхню внаслідок значного рівня ерозійного зрізу. Масштаби гранітизації спричи-

нено значно більшою тривалістю існування корої астеносфери, кількістю та агресивністю мантіїного флюїду.

Під час архейської гранітизації астеносфера в мантії та корі існує перманентно до 2,8 млрд років. Це викликано істотно іншим складом речовини, що складає мантіїні глибини. В архей та протерозої глибинам, на яких розташована сучасна мантія, притаманне збагачення базальтоїдною складовою: кремнеземом, глиноземом, залізом, кальцієм, лугами та галогенами. Розплави містять воду та вуглекислоту, сполуки азоту, мають високий окисний потенціал. Речовина подібного складу не може кристалізуватися за існуючих *PT*-умов. По-перше, температури в мантії перевищують температури солідусу водного та карбонатованого лерцоліту, які дорівнюють  $\sim 1300$  °С при тиску 3–7 ГПа [3]. Мантіїні розплави, що в архей утворюють коматіїти, мають температури до 1700 °С, базальтові магми в протерозої — не менше 1300 °С [2]. Тому потрібно виконання двох умов: позбавлення легкоплавкої базальтоїдної складової, води, вуглекислоти, вуглеводнів та інших компонентів, які для лерцоліту є надлишковими, та падіння температур. Найкращим способом виконання цих умов є конвективне винесення речовини до поверхні магматичними розплавами, збагаченими флюїдом. Розтрата теплової енергії у цьому процесі максимальна. Додатний внесок відбувається за рахунок хімічних реакцій та фазових переходів, а також утворення газової атмосфери та гідросфери.

Постійне винесення розігрітої речовини зумовлює існування шару розплаву безпосередньо в корі. Однак, за виключенням розломних зон, по яких відбувається переміщення розплавів та флюїдів, верхні надастеносферні шари кори мають температури, що близькі до температур у сучасних активних регіонах. Глибинне тепло швидко витрачається на роботу по перенесенню розігрітих розплавів та флюїдів до поверхні. Відзначимо, що регіональний палеогеотермічний градієнт протерозою близький для фанерозою та докембрію. За розрахунками В. В. Гордієнко [4], в середньому дорівнює 35 °С/км (див. рис. 1).

Загалом після першого етапу гранітизації (3,0–2,8 млрд років тому), що супроводжувала формування зеленокам'яних структур, у верхніх шарах кори ( $\sim 15$ –30 км, вище — вулканогенно-осадова товща, нижче — плагіоклазові грануліти) переважають плагіоклазові породи, які мають значний вміст кальцію. За складом можуть відповідати габро-тоналіту. Головною флюїдною складовою, що супроводжувала весь архейський етап розвитку, є водний флюїд. Він містить натрій і хлор. Карбонатний флюїд в умовах високого окисного потенціалу на диференціацію силікатних розплавів не впливає. Магматичні породи, що збагачені магнієм, кальцій концентрується в силікатах. Для архейських розплавів притаманна майже повна відсутність калію і титану, які з'являються у міру зниження окисного потенціалу (води в мантіїних осередках) та підвищення лужності в протерозої [4]. Істотно мікроклінові граніти з'являються  $\sim 2,8$ –2,6 млрд років тому (наприклад, інтрузивні мокромосковський та токовський комплекси). Серед метасоматичних перетворень найбільш поширена мікроклінізація. Гранітизація, яка відбувається 2,0 млрд років тому, призводить до поширення порід з високим вмістом калію — біотитових та мікроклінових гранітів. У багатьох випадках мікроклін є метасоматично накладеним на ранішні плагіоклазові породи, як у випадку з саксаганськими та інгулецькими різновидами, що присутні в обрамленні Криворізько-Кременчуцької зони. Подібні метасоматичні перетворення можуть відбутися при істотному збільшенні відношення  $KCl/HCl$  у глибинному водно-силікатному флюїді [4].

1. *Метаморфизм* Украинского щита / Отв. ред. И. С. Усенко. – Киев: Наук. думка, 1982. – 307 с.
2. *Шинкарев И. Ф., Иванников В. В.* Физико-химическая петрология изверженных пород. – Ленинград: Недра, 1983. – 271 с.

3. *Walter M. J. Melt Extraction and Compositionel Variability in Mantle Lithospere. – The Mantle and Core / Ed. by R. W. Carlson. – Oxford: Elsevier, 2005. – P. 363–394.*
4. *Украинский щит (геофизика, глубинные процессы) / Под ред. В. В. Гордиенко. – Киев: Корвін пресс, 2005. – 210 с.*

*Институт геофізики ім. С. І. Субботіна  
НАН України, Київ*

*Надійшло до редакції 21.11.2011*

**О. В. Усенко**

### **Условия метаморфизма и гранитизации пород Украинского щита**

*Рассмотрены условия метаморфизма докембрийских пород Украинского щита. Показано, что интенсивность преобразований зависит от давления, температуры, количества и состава привнесенного вещества. Все эти параметры непосредственно связаны с расстоянием от астеносферы, кровля которой размещается на глубине 20 км. Слой плавления в коре может возникнуть исключительно за счет поступления вещества из мантии.*

**O. V. Usenko**

### **The conditions of metamorphism and granitization of rocks of the Ukrainian shield**

*The paper deals with the conditions of metamorphism of the Precambrian rocks of the Ukrainian shield. It is shown that the intensity of a metasomatic transformation depends on the pressure, temperature, amount, and composition of an introduced matter. All these options are directly related to the distance from the asthenosphere, the roof of which is located at a depth of 20 km. A layer of melting in the crust can occur solely by revenue agents from the mantle.*





УДК 544.723.21+773.432

© 2012

Г. Н. Никовская, Н. В. Годинчук, Л. А. Керносенко,  
Ю. М. Самченко, З. Р. Ульберг

## Искусственные почвы на основе акриловых гидрогелей

(Представлено академиком НАН Украины А. Г. Наумовцем)

*Исследованы сорбционные характеристики сополимерных гидрогелей акрилового ряда для разработки искусственных почв. Установлено, что количество сорбированных ими биоэлементов уменьшается в ряду:  $\text{Fe}^{3+} > \text{Cu}^{2+} > \text{Mn}^{2+} > \text{MnO}_4^{2-} > (\text{Cu}-\Gamma)^- > (\text{Fe}-\Gamma)^- > \text{H}_2\text{PO}_4^-$ , тогда как десорбция подчиняется обратной зависимости. Выявлен эффект пролонгированной диффузии биоэлементов изученными гидрогелями, оптимальный для сополимера акриламида и акрилонитрила. Система искусственной почвы обеспечивает ускоренный рост и увеличение урожайности растений.*

В последнее десятилетие активно изучаются полиэлектролитные гели, которые при набухании могут многократно увеличиваться в объеме и сорбировать разнообразные вещества, а при изменении условий инкубации сжиматься (коллапсировать) и пролонгированно выделять ранее сорбированные вещества во внешнюю среду [1]. Развиваются исследования, основанные на обратимых фазовых переходах гидрогелей из набухшего состояния в сколлапсированное, по иммобилизации ферментов для биотехнологий, удерживанию влаги в почвах для растениеводства, созданию биосовместимых материалов, депо для “контролируемого высвобождения лекарственных препаратов” и другие [2–4]. Особый интерес в связи с прогрессирующим загрязнением окружающей среды различными токсикантами представляет возможность концентрирования гидрогелями тяжелых металлов (ТМ), многие из которых служат микроэлементами в питании растений, а также других биоэлементов для создания искусственных почв и получения экологически чистой продукции в контролируемых условиях. Целью данного исследования является изучение сорбции—десорбции активных биоэлементов гидрогелями на основе сополимеров акрилового ряда и их использования для создания искусственной почвы.

Тест-объектами исследования служили гидрогели акрилового ряда: гомополиакриламидный гель (ПААГ), сополимерный гидрогель на основе акриламида и акрилонитрила (АА–АН), сополимерный гидрогель на основе акриламида и акриловой кислоты (АА–АК), полученные по методике, детально описанной в статье [3], при концентрации сшивающего

агента N,N'-метилена-*бис*-акриламида 0,654%. Указанные мономеры являются биосовместимыми и химически устойчивыми в водных растворах. Методом прямого титрования 0,1 н. раствором гидроксида натрия в присутствии фенолфталеина установлено, что содержание карбоксильных групп в этих гидрогелях соотносится как 2 : 3 : 20. Размер пор в таких гидрогелях может достигать 80 нм [4].

Сорбцию–десорбцию гидрогелями биоэлементов оценивали по изменению их концентрации во внешнем растворе на примере меди и железа в виде сульфатов  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ , фосфора в виде  $\text{KH}_2\text{PO}_4$ , марганца в виде  $\text{MnCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{KMnO}_4$ , а также отрицательно заряженных гуминовых комплексов (ГК) меди и железа, полученных при соотношении  $\text{Me} : \text{ГК} = 1 : 6$ . Адсорбцию и десорбцию указанных субстратов изучали при перемешивании (228 об/мин) в течение 1 ч.

Определяли также статическую обменную емкость сорбентов (СОЕ) по меди в соответствии с методикой, приведенной в [5], из раствора, содержащего 20 ммоль/л  $\text{CuCl}_2$  и 50 ммоль/л  $\text{NaCl}$  при соотношении объема раствора к массе сорбента 100 : 1 и времени контакта 1 ч. Концентрацию растворов меди, железа и марганца определяли методом атомно-абсорбционной спектрофотометрии, а фосфора — колориметрическим методом по реакции с молибдатом аммония. Набухание ( $Q$ ) гидрогелей изучали волюметрическим методом.

Были исследованы адсорбция (со)полимерными гидрогелями катионов, анионов, органокомплексов ТМ из индивидуальных растворов, катионов меди и железа из бинарного раствора их сернокислых солей, а также десорбция этих веществ при помещении гелевых носителей с сорбированными субстратами в дистиллированную воду (табл. 1).

Установлено, что все исследованные вещества по сродству к полимерным гелям можно распределить в следующий ряд:  $\text{Fe}^{3+} > \text{Cu}^{2+} > \text{Mn}^{2+} > \text{MnO}_4^{2-} > (\text{Cu}-\Gamma)^- > (\text{Fe}-\Gamma)^- > \text{H}_2\text{PO}_4^-$ . Степень их десорбции подчиняется противоположной зависимости. Из изученных гелей наиболее активным в отношении всех тест-объектов является сополимер АА–АК, содержащий в сравнении с другими использованными сорбентами максимальное количество активных карбоксильных групп. Величины обменной емкости для исследованных гидрогелей, а также описанных в литературе ионообменников составляют, мг-экв  $\cdot \text{г}^{-1}$ : 1,5 ПААГ; 1,9 АА–АК; 1,3 АА–АН; 2,0 ПОЛИОРГ-34 (катионообменник) [5]; 1,7 вермикулит [6]. Это позволяет отнести исследованные гидрогели, особенно АА–АК, к эффективным сорбентам ТМ.

Таблица 1. Сравнение эффективности адсорбции (А, %) биоэлементов\* (в форме катионов, анионов, гуматных комплексов) гидрогелями и их десорбции (Д, %) дистиллированной водой

Сорбат	А / Д, %		
	ПААГ	АА–АН	АА–АК
$\text{Mn}^{2+}$	80,5 / 10,0	76,5 / 9,5	98,2 / 1,0
$\text{MnO}_4^{2-}$	80,0 / 12,0	72,0 / 8,0	95,5 / 2,5
$\text{Cu}^{2+}$	78,5 / 8,0	70,0 / 12,5	99,8 / 0,8
$(\text{Cu}-\Gamma)^-$	50,0 / 39,0	48,0 / 28,0	92,5 / 9,5
$\text{Fe}^{3+}$	82,5 / 8,5	80,0 / 9,5	99,5 / 0,5
$(\text{Fe}-\Gamma)^-$	46,0 / 40,0	40,0 / 28,0	78,0 / 32,0
$\text{Fe}^{3+}-\text{Cu}^{2+}$	—	—	98,5–92,0 / 1,0–2,2
$\text{H}_2\text{PO}_4^-$	27,5/7,5	35,0/2,0	22,5/4,0

\* Исходная концентрация биоэлементов — 2 ммоль/л.

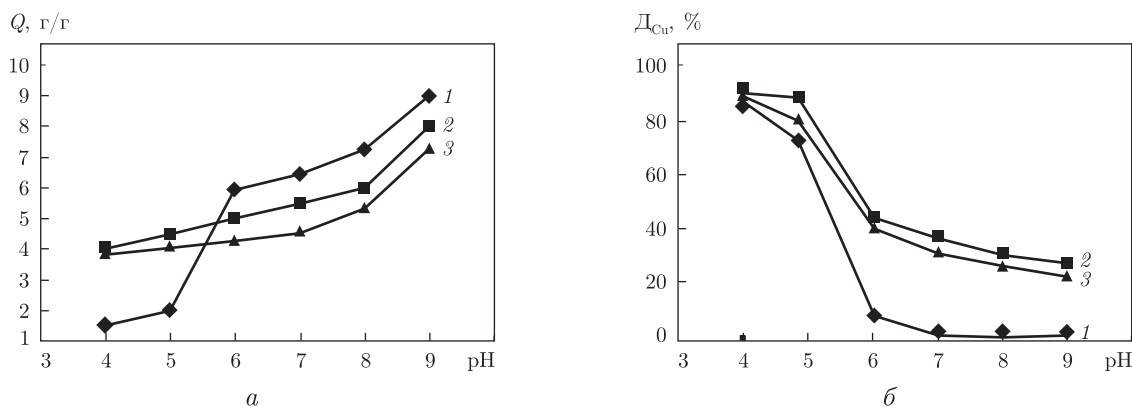


Рис. 1. Зависимость коэффициента набухания гидрогелей (а) и степени десорбции меди (б) от рН раствора: 1 — АА-АК; 2 — АА-АН; 3 — ПААГ

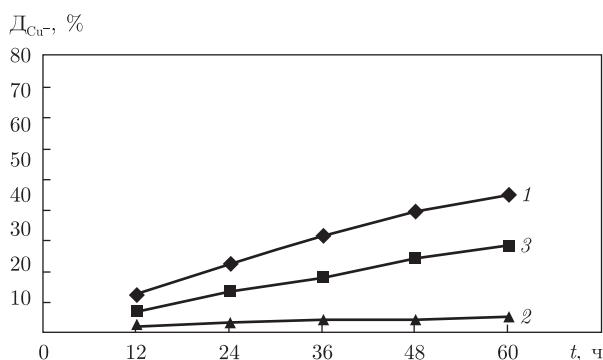


Рис. 2. Кинетика десорбции иона меди в дистиллированной воде с гидрогелей: 1 — АА-АК; 2 — АА-АН; 3 — ПААГ

Десорбция биоэлементов, в частности, меди из гидрогелей ПААГ, АА-АН достаточно эффективно происходит во всем диапазоне рН, в то время как гель АА-АК прочно удерживает металл-ион в области рН ниже 6 (рис. 1). Однако при снижении рН до 5,0–4,0 происходит практически полная десорбция иона меди с этого и других гидрогелей. Изучена динамика изменения коэффициента  $Q$  гидрогелей при различных величинах рН в условиях пассивного контакта — без перемешивания (см. рис. 1). В области рН 5,0–6,0 они претерпевают фазовый переход между набухшим и сколлапсированным состоянием — в кислой среде происходит подавление ионизации кислотных групп поверхности гидрогелей, коллапс гидрогелей за счет образования системы водородных связей и, как следствие, выделение ранее сорбированных веществ во внешний раствор. Адсорбция биоэлементов происходит синхронно с набуханием гидрогелей, десорбция — с их коллапсом. В условиях пассивного контакта установлена пролонгированная (замедленная) десорбция модельного биоэлемента (меди), наиболее выраженная в случае АА-АН (рис. 2).

На основе этого гидрогеля была приготовлена искусственная почва путем последовательного его насыщения растворами микро- и макроэлементов в соответствии с агрохимическими таблицами [7] с заключительной обработкой сульфат- и фосфатсодержащими растворами. Это обеспечивало формирование гидрогелевых нанокомпозитов с малорастворимыми наночастицами биоэлементов, локализованными в порах гидрогеля и способных по-

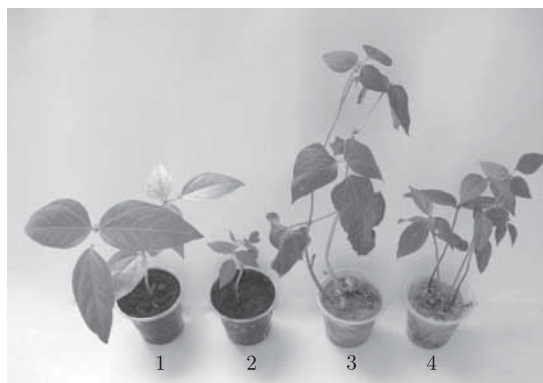


Рис. 3. Влияние типа почвы на рост бобовых: 1 — черноземная почва; 2 — то же +4% АА-АН с комплексом биоэлементов; 3 — искусственная почва — песок +4% АА-АН с комплексом биоэлементов; 4 — искусственная почва — АА-АН с комплексом биоэлементов. Экспозиция — 30 сут

степенно диффундировать во внешнюю среду под воздействием корневых выделений растений. Взаимодействие растений и почвы имеет сложный характер [7]: питательные вещества поступают в растение путем диффузии и активного транспорта в процессе метаболизма. Установлено (рис. 3), что по сравнению с природной черноземной почвой искусственная почва обеспечивает ускоренное развитие и повышение урожая растений при использовании в качестве микроудобрения (добавка к песку/почве) либо самостоятельной питательной среды.

Таким образом, показана возможность эффективной сорбции акриловыми гидрогелями биоэлементов различной химической природы, их пролонгированной десорбции во внешнюю среду, интенсивного роста растений на полученной искусственной почве. Результаты проведенных исследований могут быть положены в основу разработки искусственной почвы для получения экологически чистой растительной продукции.

1. Самченко Ю. М., Пасмурцева Н. А., Ульберг З. Р. Гидрогелевые нанореакторы медицинского назначения // Доп. НАН Украины. — 2007. — № 2. — С. 146–150.
2. Самченко Ю. М. Соплимерные гидрогели медицинского назначения. Синтез. Свойства и применение. — Saarbrücken: LAP LAMBERT Acad. Publ., 2011. — 340 р.
3. Самченко Ю. М., Атаманенко И. Д., Полторацкая Т. П., Ульберг З. Р. Состояние воды в мелкодисперсных гидрогелях на основе акриламида и акриловой кислоты // Коллоид. журн. — 2006. — **68**, № 5. — С. 670–673.
4. Samchenko Yu., Ulberg Z., Korotych O. Multipurpose smart hydrogel systems // Adv. Colloid and Interface Sci. — 2011. — **168**. — P. 247–262.
5. Мясоедова Г. В., Никашина В. А., Молочникова Н. П. Свойства новых типов волокнистых сорбентов с амидоксимными и гидразиновыми группами // Журн. аналит. химии. — 2000. — **55**, № 6. — С. 611–615.
6. Поляков В. Е., Тарасевич Ю. И., Овчаренко Ф. Д. Ионнообменные равновесия и термодинамика ионного обмена на вермикулите с участием ионов переходных металлов // Укр. хим. журн. — 1975. — **41**, № 7. — С. 689–692.
7. Солдатов В. С., Перышкина Н. Г., Хорошко И. Г. Ионитные почвы. — Минск: Наука и техника, 1978. — 420 с.

Институт биокolloидной химии  
им. Ф. Д. Овчаренко НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 16.01.2012

Г. М. Ніковська, Н. В. Годинчук, Л. О. Керносенко, Ю. М. Самченко,  
З. Р. Ульберг

### Штучні ґрунти на основі акрилових гідрогелів

*Досліджено сорбційні характеристики співполімерних гідрогелів акрилового ряду для розробки штучних ґрунтів. Встановлено, що кількість сорбованих ними біоелементів зменшується в такому ряді:  $\text{Fe}^{3+} > \text{Cu}^{2+} > \text{Mn}^{2+} > \text{MnO}_4^{2-} > (\text{Cu}-\Gamma)^- > (\text{Fe}-\Gamma)^- > \text{H}_2\text{PO}_4^-$ , тоді як десорбція підпорядковується зворотній залежності. Виявлено ефект пролонгованої дифузії біоелементів вивченими гідрогелями, оптимальний для співполімеру акриламід-акрилонітрилу. Система штучного ґрунту забезпечує прискорений ріст і підвищену продуктивність рослин.*

G. N. Nicovskaya, N. V. Godinchuk, L. A. Kernosenko, J. M. Samchenko,  
Z. R. Ulberg

### Artificial soils based on acrylic hydrogels

*Sorption parameters of acrylic copolymer hydrogels for the development of artificial soils are investigated. It is established that the amount of bioelements adsorbed by them decreased in the row:  $\text{Fe}^{3+} > \text{Cu}^{2+} > \text{Mn}^{2+} > \text{MnO}_4^{2-} > (\text{Cu}-\Gamma)^- > (\text{Fe}-\Gamma)^- > \text{H}_2\text{PO}_4^-$ , whereas their desorption had reverse dependence. The prolonged effect of the diffusion of bioelements, which is optimal for acrylamide and acrylonitrile copolymer is revealed. The artificial soil system provides the enhanced plant growth and yield.*

Ю. О. Тітов, Н. М. Білявина, В. Я. Марків,  
член-кореспондент НАН України М. С. Слободяник,  
В. В. Полубінський

## Кристалічна структура $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$

*Методом рентгеноструктурного аналізу порошку визначено шарувату перовськітоподібну структуру (ШПС) ніобату  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ , який синтезовано низькотемпературною (1120 К) термообробкою спільноосаджених гідроксикарбонатів. Встановлено, що кристалічна ШПС  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  належить до структурного типу  $\text{Sr}_3\text{LaTa}_3\text{O}_{12}$ . Параметри елементарної комірки  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ :  $a = 0,5659(1)$  нм,  $c = 2,7178(7)$  нм, просторова група  $R\text{-}\bar{3}m$ ,  $R_B = 0,076$  для 152 незалежних відбиттів. Виявлено вплив способу (температури) синтезу на будову ШПС  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ . Проаналізовано фактори, які визначають термостабільність дефектної ШПС  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ .*

Матеріали на основі оксидних сполук типу  $\text{A}_4\text{B}_3\text{O}_{12}$  ( $\text{A} = \text{Ba}, \text{Sr}, \text{La}, \text{Nd}$ ,  $\text{B} = \text{Nb}, \text{Ta}, \text{Ti}, \text{Mg}, \text{Zn}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{W}, \text{Re}$ ) з дефектною шаруватою перовськітоподібною структурою (ШПС) мають комплекс діелектричних властивостей, які відповідають вимогам сучасної мобільної телекомунікаційної індустрії [1–4].

Отримання однієї з таких сполук,  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ , проводилось науковцями в роботах [1–4] методом високотемпературного ( $T > 1620$  К) керамічного синтезу. Щодо кристалічної структури сполуки  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ , то для неї було запропоновано дві структурні моделі в просторових групах  $R\text{-}\bar{3}$  або  $R\text{-}\bar{3}m$ . Проведене в дослідженні [3] уточнення моделі структури  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  у просторовій групі  $R\text{-}\bar{3}m$  виявилось невдалим (фактор розбіжності  $R_{\text{wp}} = 0,265$ ), тому автори робіт [3] й [4] розрахували структуру  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  у просторовій групі  $R\text{-}\bar{3}$  (величини  $R_{\text{wp}} = 0,046$  й  $0,075$  відповідно).

Характер термічної поведінки ніобату  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ , отриманого з використанням низькотемпературного методу синтезу [5], істотно відрізняється від такого для зразків  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ , синтезованих за допомогою високотемпературної керамічної технології [3, 4]. Так, згідно з даними авторів [5], утворення  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  з шихти спільноосаджених гідроксикарбонатів (СОГК) відбувається при 1120 К, а вище 1120 К починається його поступовий розклад за схемою  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12} \rightarrow \text{Sr}_4\text{Nb}_4\text{O}_{14} + \text{LaSr}_2\text{Nb}_2\text{O}_{8,5}$ . Вищезазначене давало підстави для припущення про відмінність будови ШПС синтезованого термообробкою СОГК  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  від такої для зразків  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ , які були отримані в роботах [3, 4]. З'ясування цього питання є практично важливим, оскільки, згідно з публікаціями [1–4], будова сполук типу  $\text{A}_4\text{B}_3\text{O}_{12}$  істотно впливає на їх мікрохвильові діелектричні властивості.

Метою даної роботи є визначення кристалічної структури отриманого низькотемпературним синтезом із шихти СОГК  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  та її порівняльний аналіз із будовою зразків  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ , синтезованих за високотемпературною керамічною технологією.

Спільне осадження гідроксикарбонатів  $\text{Sr}$ ,  $\text{La}$  та  $\text{Nb}$  проводили у водному буферному розчині  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O} + (\text{NH}_4)_2\text{CO}_3$  з  $\text{pH} \approx 8,5$ . За вихідні використано водні розчини  $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$ ,  $\text{La}(\text{NO}_3)_3$  марок “х. ч.” та метанольний розчин  $\text{NbCl}_5$  марки “о. с. ч.”. Дифрактограми зразків записано на дифрактометрі ДРОН-3 у дискретному режимі (крок сканування  $0,03^\circ$ , експо-

зиція в точці 5 с) на мідному фільтрованому випромінюванні. Управління процесом зйомки та збором інформації, початкова обробка дифрактограм, а також структурні розрахунки виконано з використанням апаратно-програмного комплексу [6].

Виходячи із даних [5] — про послідовність фазових перетворень при термообробці Sr-, La-, Nb-вмісної шихти СОГК, для отримання однофазних зразків  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  нами був використаний “ударний” режим термообробки шляхом внесення повітряносухої шихти СОГК зі співвідношенням  $\text{Sr} : \text{La} : \text{Nb} = 3 : 1 : 3$  у піч, розігріту до 1120 К, і витримці зразка при цій температурі впродовж 2 год.

Дифрактограми отриманого за цих умов  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  виявилися подібними до дифрактограм відомих тришарових сполук типу  $\text{A}_4\text{B}_3\text{O}_{12}$ :  $\text{Sr}_3\text{LaTa}_3\text{O}_{12}$  (пр. гр. R-3m) [7],  $\text{Ba}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  (пр. гр. R-3m) [8] та синтезованого за керамічною технологією ( $T = 1620\text{--}1770$  К)  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  (пр. гр. R-3) [3, 4].

Індексування дифрактограм отриманого термообробкою шихти СОГК  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  показало, що вони задовільно індексуються у тригональній сингонії, а систематика згасань відбиттів на дифрактограмах  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  відповідає відомим просторовим групам для тришарових сполук типу  $\text{A}_4\text{B}_3\text{O}_{12}$ : R-3m або R-3.

Первинну оцінку координат атомів для початкової моделі структури  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  проведено, виходячи з більш високосиметричної просторової групи R-3m. Зіставлення експериментальних і розрахованих для такої моделі структури інтенсивностей відбиттів показало їх задовільну збіжність. Результати уточнення координатних та теплових параметрів структури  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ , а також дифракційні дані наведено в табл. 1–3 та на рис. 1–3. Уточнений при розрахунку структури склад цієї сполуки (15,79 ат. % Sr, 5,25% La, 15,79% Nb, 63,17% O) у межах похибки визначення відповідає експериментально заданому.

Кристалічна структура отриманого з шихти СОГК  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  побудована з двовимірних (нескінчених в напрямках осей X і Y) перовськітоподібних блоків товщиною в три шари октаедрів  $\text{NbO}_6$  (див. рис. 2). Безпосередній зв'язок між зовнішньоблочними октаедрами  $\text{NbO}_6$  сусідніх перовськітоподібних блоків у ШПС  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  відсутній. Блоки розділені шаром поліедрів  $(\text{SrLa})(1)\text{O}_{12}$  і утримуються разом за допомогою зв'язків  $\text{—O—}(\text{Sr, La})(1)\text{—O—}$ . З дванадцяти атомів оксигену поліедра  $(\text{Sr,La})(1)\text{O}_{12}$  дев'ять (шість O(2) та три O(1)) належать до того ж блока, що і атоми  $(\text{Sr,La})(1)$ , а три атоми оксигену (O(2)) належать до сусіднього блока (див. рис. 3). Координаційне число внутрішньоблочних

Таблиця 1. Кристаліграфічні дані  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  (Cu  $K\alpha_1$  випромінювання)

Атом	Позиція	X	Y	Z	Заповнення
Sr(1)	6c	0	0	0,1404(7)	0,82(4)
La(1)	6c	0	0	0,1404(7)	0,18(4)
Sr(2)	6c	0	0	0,2814(7)	0,68(4)
La(2)	6c	0	0	0,2814(7)	0,32(4)
Nb(1)	6c	0	0	0,4222(6)	1
Nb(2)	3a	0	0	0	1
O(1)	18h	0,167	0,333	0,036(2)	1
O(2)	18h	0,167	0,333	0,452(1)	1
Просторова група		R-3m (no 166)			
Періоди кристалічної ґратки, нм		$a = 0,5659(1)$ , $c = 2,7178(7)$ $\alpha = 90^\circ$ , $\beta = 90^\circ$ , $\gamma = 120^\circ$			
Незалежні відбиття		152			
Загальний ізотропний В-фактор, нм <sup>2</sup>		$0,82(4) \cdot 10^{-2}$			
Фактор недостовірності		$R_B = 0,076$			

атомів (Sr,La)(2) дорівнює 12, а їх координаційний поліедр є деформованим кубооктаедром (Sr,La)(2)O<sub>12</sub> (див. табл. 2, 3).

Необхідність “зшивання” у ШПС Sr<sub>3</sub>LaNb<sub>3</sub>O<sub>12</sub> перовськітоподібних блоків між собою через зв’язки O–(Sr, La)(1)–O– обумовлює більшу деформацію зовнішньоблочних поліедрів (SrLa)(1)O<sub>12</sub> у порівнянні з внутрішньоблочними кубооктаедрами (Sr,La)(2)O<sub>12</sub>.

Таблиця 2. Деякі міжатомні відстані та ступінь деформації ( $\Delta$ ) поліедрів (Sr, La)O<sub>12</sub> та NbO<sub>6</sub> у кристалічній структурі Sr<sub>3</sub>LaNb<sub>3</sub>O<sub>12</sub>

Атом	<i>d</i> , нм	Атом	<i>d</i> , нм
(Sr, La)(1)–3O(2)*	0,260(1)	(Sr, La)(2)–3O(2)	0,244(1)
–6O(2)	0,289(2)	–6O(1)	0,286(1)
–3O(1)	0,328(3)	–3O(1)	0,289(2)
(Sr, La)(1)–O <sub>сеп</sub>	0,292	(Sr, La)(2)–O <sub>сеп</sub>	0,276
$\Delta$ (Sr, La)(1)O <sub>12</sub>	$69 \cdot 10^{-4}$	$\Delta$ (Sr, La)(2)O <sub>12</sub>	$46 \cdot 10^{-4}$
Nb(1)–3O(2)	0,183(1)	Nb(2)–6O(1)	0,191(1)
–3O(1)	0,217(2)	Nb(2)–O <sub>сеп.</sub>	0,191
Nb(1)–O <sub>сеп</sub>	0,200	$\Delta$ Nb(2)O <sub>6</sub>	0
$\Delta$ Nb(1)O <sub>6</sub>	$72 \cdot 10^{-4}$		

Примітка. \* Міжблочна відстань (O(2)–атоми оксигену октаедра Nb(1)O<sub>6</sub> із сусіднього перовськітоподібного блока); розрахунок ступеня деформації поліедрів MeO<sub>n</sub> проведено за формулою:  $\Delta = 1/n \sum [(R_i - \bar{R})/\bar{R}]^2$  (*R<sub>i</sub>* – відстані Me–O,  $\bar{R}$  – середня відстань Me–O, *n* – координаційне число) [9].

Таблиця 3. Порівняльні кристалографічні параметри зразків Sr<sub>3</sub>LaNb<sub>3</sub>O<sub>12</sub>, отриманих із шихти СОГК (1120 К) та за керамічною технологією (1670 К) [4]

Кристалографічні параметри	Sr <sub>3</sub> LaNb <sub>3</sub> O <sub>12</sub> пр. гр. R-3m	Sr <sub>3</sub> LaNb <sub>3</sub> O <sub>12</sub> [4] пр. гр. R-3
Періоди кристалічної ґратки, нм	<i>a</i> = 0,5659(1), <i>c</i> = 2,7178(7)	<i>a</i> = 0,56556(1), <i>c</i> = 2,71756(4)
Фактор недостовірності	R <sub>B</sub> = 0,076	R <sub>wp</sub> = 0,075
Середня відстань (Sr, La)–O у зовнішньоблочному поліедри (Sr,La)O <sub>12</sub> , нм	0,292	0,288
Середня відстань (Sr, La)–O у внутрішньоблочному поліедри (Sr, La)O <sub>12</sub> , нм	0,276	0,279
Міжблочна відстань (Sr, La)–O, нм	0,260(1)	0,2592(4)
Заповнення зовнішньоблочних кубооктаедричних позицій	Sr 0,82(4) La 0,18(4)	0,94(6) 0,06(6)
Заповнення внутрішньоблочних кубооктаедричних позицій	Sr 0,68(4) La 0,32(4)	0,56(6) 0,44(6)
Середня відстань Nb–O у зовнішньоблочному октаедри NbO <sub>6</sub> , нм	0,200	0,201
Середня відстань Nb–O у внутрішньоблочному октаедри NbO <sub>6</sub> , нм	0,191	0,199
Ступінь деформації зовнішньоблочних поліедрів (Sr,La)O <sub>12</sub>	$69 \cdot 10^{-4}$	$117 \cdot 10^{-4}$
Ступінь деформації внутрішньоблочних поліедрів (Sr, La)O <sub>12</sub>	$46 \cdot 10^{-4}$	$67 \cdot 10^{-4}$
Ступінь деформації зовнішньоблочних октаедрів NbO <sub>6</sub>	$72 \cdot 10^{-4}$	$48 \cdot 10^{-4}$
Ступінь деформації внутрішньоблочних октаедрів NbO <sub>6</sub>	0	0



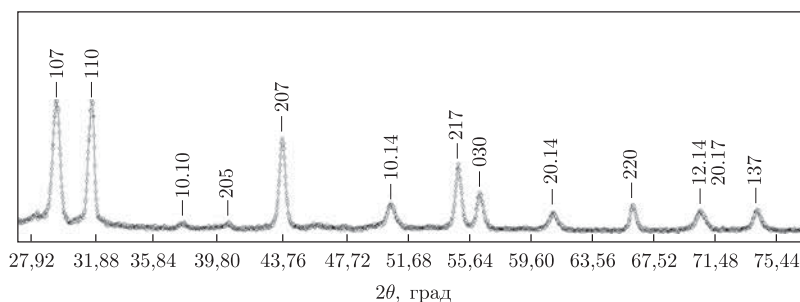


Рис. 1. Фрагмент дифракційного спектра порошків (крапки) і розрахунковий спектр (суцільна лінія)  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  (Cu  $K\alpha_1$  випромінювання)

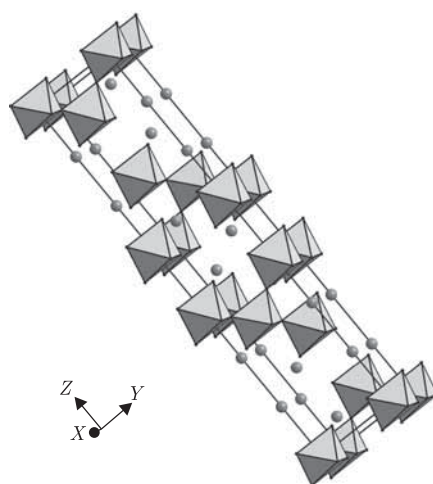


Рис. 2. Кристалічна структура  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  у вигляді октаєдрів  $\text{NbO}_6$  та атомів Sr і La

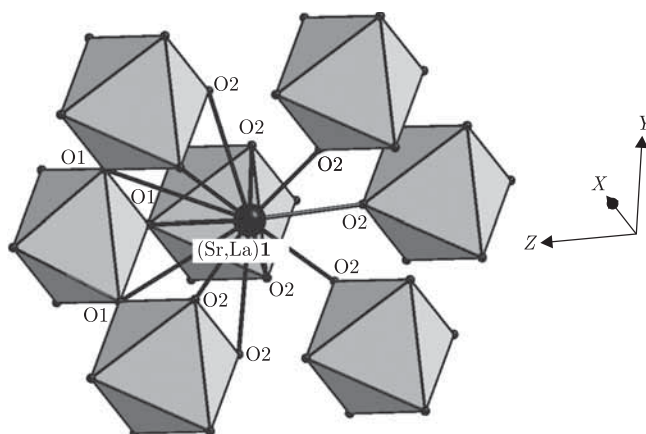


Рис. 3. Будова міжблочної границі в шаруватій перовськітоподібній структурі  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$

У ШПС  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  розподіл атомів Sr й La має частково упорядкований характер (на відміну від статистичного у  $\text{Sr}_3\text{LaTa}_3\text{O}_{12}$  [7]) із переважною локалізацією більших атомів стронцію на границях перовськітоподібних блоків, а атомів лантану у внутрішньоблочних кубооктаєдричних порожнинах перовськітоподібного блока.

Відомо, що тенденція до упорядкування в іонних кристалах визначається в основному різницею іонних зарядів  $\Delta q$  і радіусів  $\Delta R_B$  та електронною будовою катіонів. Оскільки розмір і заряд іона  $\text{Nb}^{5+}$  однакові з іоном  $\text{Ta}^{5+}$ , тому ці характеристики не можуть бути причиною виникнення надструктури розміщення в  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ . Це дає підстави стверджувати, що частково впорядкований характер розподілу катіонів  $\text{Sr}^{2+}$  й  $\text{La}^{3+}$  у ШПС обумовлений в основному електронною будовою катіона  $\text{Nb}^{5+}$ .

Зіставлення довжин зв'язків Nb–O та ступенів деформації октаедрів  $\text{NbO}_6$  у ШПС  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  показало, що внутрішньоблочні октаедри  $\text{Nb}(2)\text{O}_6$  є практично ідеальними, в той час як для зовнішньоблочних октаедрів  $\text{Nb}(1)\text{O}_6$  характерна досить значна різниця у довжинах зв'язків Nb(1)–O (0,183(1) і 0,217(2) нм) та досить значна величина ступеня деформації ( $\Delta\text{Nb}(1)\text{O}_6$ , яка складає  $72 \cdot 10^{-4}$  (див. табл. 2)). Незначна ступінь деформації внутрішньоблочних октаедрів  $\text{VO}_6$  узагалі є характерною особливістю оксидних сполук із ШПС.

Зіставлення характеристик ШПС зразків  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ , які були отримані низькотемпературною термообробкою СОГК, із такими для зразків одержаних у [4] із застосуванням високотемпературної керамічної технології синтезу, показало ряд відмінностей в будові їх тришарових ШПС (див. табл. 3).

Зокрема, в синтезованому за низьких температур  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  відсутній взаємний нахил октаедрів  $\text{NbO}_6$ , який має місце в ШПС отриманих за керамічною технологією зразках  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  [4]. Крім того, отримані термообробкою СОГК зразки  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  характеризуються меншими розмірами внутрішньоблочних октаедрів  $\text{NbO}_6$ , меншою деформацією як зовнішньоблочних, так і внутрішньоблочних поліедрів  $(\text{Sr}, \text{La})\text{O}_{12}$ . Більшою виявилась лише деформація зовнішньоблочних октаедрів  $\text{NbO}_6$ . Слід також відзначити дещо більш статистичний характер розподілу атомів стронцію і лантану по кубооктаедричних позиціях ШПС, притаманний “низькотемпературному”  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  (див. табл. 3).

У цілому результати порівняльного аналізу дають підстави для висновку, що застосування низькотемпературного методу синтезу  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  призводить до формування менш деформованої ШПС, ніж при використанні керамічної технології його синтезу.

Причиною зафіксованих відмінностей у будові ШПС та термостабільності отриманих різними способами зразків  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  є, очевидно, істотно різні температури безпосереднього формування їх ШПС із вихідних компонентів. Вірогідний механізм впливу цього фактора розглянуто нижче.

Близький до  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  характер термічної поведінки має титанат лантану  $\text{La}_{2/3}\square_{1/3}\text{TiO}_3$  зі структурою дефектного перовськіту. Зокрема, синтезований при 670–1070 К із шихти спільноосаджених гідроксидів  $\text{La}_{2/3}\square_{1/3}\text{TiO}_3$  є термічно нестабільним і понад 1070 К розкладається [10]. Проте використання керамічної технології його отримання з температурами синтезу 1570–1770 К призводить до стабілізації  $\text{La}_{2/3}\square_{1/3}\text{TiO}_3$ , який залишається стабільним при охолодженні до кімнатної температури. Причиною стабілізації, згідно з працями [11, 12], є незначне зменшення дефектності структури  $\text{La}_{2/3}\square_{1/3}\text{TiO}_3$  до рівня 29–32%, яке відбувається при високих температурах синтезу за рахунок незначного відновлення титану, утворення оксигенових вакансій та входження до складу зразка мікродомішок матеріалу тигля.

Можна припустити, що близькі механізми термостабілізації реалізуються і для  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  (у дефектній ШПС якого 25% позицій типу В вакантні), що зумовлює залежність його термостабільності від температури синтезу.

Таким чином, у даному дослідженні методом рентгеноструктурного аналізу порошку визначено кристалічну структуру ніобату  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ , який синтезовано термообробкою шихти СОГК при низькій (1120 К) температурі, а також проаналізовано вплив умов синтезу  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  на особливості будови його ШПС та термостабільність.

1. *Lichtenberg F., Herrnberge A., Wiedenmann K.* Synthesis, structural, magnetic and transport properties of layered perovskite-related titanates, niobates and tantalates of the type  $\text{A}_n\text{B}_n\text{O}_{3n+2}$ ,  $\text{A}^{\text{I}}\text{A}_{k-1}\text{B}_k\text{O}_{3k+1}$  and  $\text{A}_m\text{B}_{m-1}\text{O}_{3m}$  // *Prog. in Solid State Chem.* – 2008. – **36**, No 4. – P. 253–387.
2. *Schaak R. E., Mallouk T. E.* Perovskites by design: a toolbox of solid state reactions // *Chem. Mater.* – 2002. – **14**, No 4. – P. 1455–1471.
3. *Rawal R., McQueen A. J., Gillie L. J. et al.* Influence of octahedral tilting on the microwave dielectric properties of  $\text{A}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  hexagonal perovskites (A = Ba, Sr) // *Appl. Phys. Lett.* – 2009. – **94**, No 19. – 192904, 3 p.
4. *Adams R. M.* Structure – composition – property relations in B – site deficient hexagonal perovskite systems: Thesis. . . . doctor of philosophy. – Huddersfield, England, 2010. – 223 p.
5. *Титов Ю. А., Слободяник Н. С., Полубинский В. В., Чумак В. В.* Механизмы образования слоистых соединений типа  $\text{A}_4\text{B}_3\text{O}_{12}$  из систем совместноосажденных гидроксокарбонатов и гидроксидов // *Теорет. и эксперим. химия.* – 2011. – **47**, № 6. – С. 380–384.
6. *Марків В. Я., Белявіна Н. М.* Апаратно-програмний комплекс для дослідження полікристалічних речовин за їх дифракційними спектрами // *Тез. доп. Другої міжнар. конф. “Конструкційні та функціональні матеріали”.* – Львів, 1997. – С. 260–261.
7. *Антонов В. А., Арсеньев П. А., Копылова Е. К.* Кристаллическая структура  $\text{Sr}_3\text{LaTa}_3\text{O}_{12}$  // *Кристаллография.* – 1990. – **35**, № 3. – С. 630–633.
8. *Kemmler-Sack S.* Die rhomboedrischen 12 L-stapelvarianten  $\text{Ba}_3\text{A}_3\text{M}_3^{\text{V}}\square\text{O}_{12}$  mit  $\text{M}^{\text{V}} = \text{Nb, Ta}$  // *Z. anorg. allg. chem.* – 1980. – **461**. – P. 151–154.
9. *Shannon R. D.* Revised effective ionic radii and systematic studies of interatomic distances in halides and halogenides // *Acta Crystallogr.* – 1976. – **A32**, No 5. – P. 751–767.
10. *Щербакова Л. Г., Мамсурова Л. Г., Суханова Г. Е.* Титанаты редкоземельных элементов // *Успехи химии.* – 1979. – **48**, № 3. – С. 423–447.
11. *Василечко Л. О.* Кристаллохімія та фазові перетворення складних оксидів рідкісноземельних елементів зі структурою перовскіту: Дис. . . . д-ра хім. наук. – Львів, 2004. – 343 с.
12. *Skapin, S. D., Kolar D., Suvorov D.* Phase stability and equilibria in the  $\text{La}_2\text{O}_3\text{–TiO}_2$  system // *J. Europ. Ceramic Soc.* – 2000. – **20**, No 8. – P. 1179–1185.

Київський національний університет  
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 23.01.2012

**Ю. А. Титов, Н. Н. Белявіна, В. Я. Марків,**  
член-корреспондент НАН України **Н. С. Слободяник, В. В. Полубинский**

### **Кристаллическая структура $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$**

*Методом рентгеноструктурного анализа порошка определена слоистая перовскитоподобная структура (СПС) ниобата  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ , синтезированного низкотемпературной (1120 К) термообработкой совместноосажденных гидроксокарбонатов. Установлено, что кристаллическая СПС  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  принадлежит к структурному типу  $\text{Sr}_3\text{LaTa}_3\text{O}_{12}$ . Параметры элементарной ячейки  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ :  $a = 0,5659(1)$  нм,  $c = 2,7178(7)$  нм, пространственная группа  $R\text{-}3m$ ,  $R_B = 0,076$  для 152 независимых отражений. Выявлено влияние способа (температуры) синтеза на строение СПС  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ . Проанализированы факторы, определяющие термостабильность дефектной СПС  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ .*

**Y. A. Titov, N. M. Belyavina, V. Ya. Markiv,**  
Corresponding Member of NAS of Ukraine **M. S. Slobodyanik, V. V. Polubinsky**

### **Crystal structure of $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$**

*The layer perovskite-like structure (LPS) of niobate  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  synthesized by low-temperature (1120 K) heat treatment of co-precipitated hydroxycarbonates has been determined by X-ray powder diffraction. It is found that the crystal LPS of  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  belongs to the  $\text{Sr}_3\text{LaTa}_3\text{O}_{12}$  type. The cell constants of  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  are:  $a = 0.5659(1)$  nm,  $c = 2.7178(7)$  nm, space group is  $R\bar{3}m$ ,  $R_B = 0.076$  for 152 independent reflections. The influence of a method (temperature) of synthesis on the LPS of  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$  has been revealed. The factors, determining the thermal stability of the defective LPS  $\text{Sr}_3\text{LaNb}_3\text{O}_{12}$ , are analyzed.*

М. Г. Щербина, О. В. Костюк, М. В. Іщенко, С. А. Куліченко

## Комплексне використання катіонної поверхнево-активної речовини для визначення залишкових кількостей міді на поверхнях

(Представлено членом-кореспондентом НАН України В. М. Зайцевим)

*Встановлено можливість використання цетилпіридиній хлориду для стабілізації колоїдно-хімічного стану розчинів діетилдитіокарбамату міді, змивання залишкових кількостей міді з аналізованої поверхні та як утворювача фази-колектора при концентруванні. Показано раціональне поєднання катіоноактивних міцелярних фаз із спектрофотометричним, атомно-абсорбційним та кольориметричним методами детектування. Розроблено гібридну методику з попереднім міцелярно-екстракційним концентруванням у рідку катіоноактивну фазу, що апробована при визначенні залишкових кількостей міді на поверхні ягід винограду після їх обробки фунгіцидом.*

Здатність розчинів неіонних поверхнево-активних речовин (ПАР) утворювати гетерофазні системи при температурі помутніння застосовується в практиці аналізу для вилучення та розділення мікрокомпонентів [1]. Перспективність використання неіонних міцелярних фаз у методах концентрування зумовлена досягненням високих коефіцієнтів концентрування та легкістю поєднання з фізико-хімічними методами визначення. Однак необхідність нагрівання розчинів неіонних ПАР обмежує застосування таких систем при визначенні лабільних субстратів.

Альтернативою екстракції фазами неіонних ПАР виступають низькотемпературні фазові переходи у розчинах іонних ПАР. Крім дії температури, фазове розшарування у розчинах іонних ПАР стимулюють введенням електролітів та органічних модифікаторів [2, 3]. Однак домішки електролітів сприяють утворенню кристалічних осадів іонних ПАР великого об'єму, використання яких для цілей концентрування є обмеженим. Серед досліджених органічних модифікаторів найбільш ефективною виявилась саліцилова кислота ( $H_2Sal$ ), введення якої у розчини іонних ПАР сприяє формуванню компактних рідких міцелярних фаз при кімнатній температурі [4]. Такі фази технологічно зручні та забезпечують високі параметри концентрування.

Мідь є важливим біоелементом, в організмі людини сприяє синтезу гемоглобіну і сполучної тканини, входить до складу багатьох ферментів. Тому визначення вмісту міді в об'єктах довкілля є традиційно важливим аналітичним завданням.

Визначення вмісту міді зазвичай проводять спектрофотометрично у вигляді комплексу з діетилдитіокарбаматом (ДДТК); поширеними методами визначення міді є також атомна абсорбція [5] та кольориметрія [6]. Останнім часом для кількісного кольориметричного визначення мікрокомпонентів застосовують сканери та комп'ютерні програми обробки зображень [7].

Мета нашого дослідження — розробка гібридних методик визначення міді з попереднім міцелярно-екстракційним концентруванням у рідкі катіоноактивні фази цетилпіридиній хлориду (ЦПХ) з фотометричним, атомно-абсорбційним (ААС) та кольориметричним варіантами детектування.

**Об'єкти та методи дослідження.** У ході роботи використовували ЦПХ (“Merck” з вмістом основної речовини >99%),  $H_2Sal$ , ДДТК кваліфікації “ч. д. а.”; їх робочі розчини готували з відповідних точних наважок у дистильованій воді. Робочий розчин міді з концентрацією 15 мг/л отримували розчиненням перекристалізованого  $CuSO_4 \cdot 5H_2O$  “ч. д. а.” у підкисленому дистилаті. Точний вміст міді у розчині визначали титриметрично [8]. Розчин  $HNO_3$  готували за фіксаналом.

Кислотність розчинів контролювали за допомогою рН-метра “рН 340” із скляним електродом ЕСЛ-43–07. Спектри поглинання розчинів вимірювали на спектрофотометрах “СФ-46” та “КФК-3”. ААС визначення міді проводили на спектрометрі “Сатурн” (горюча суміш пропан-бутан-повітря). Вимірювання кольориметричних характеристик міцелярних екстрактів здійснювали за допомогою сканера “Mustek Scanner 1200 UB”. Отримані міцелярні екстракти переносили у спеціальну кювету (закріплене на тонкому скельці фторопластове кільце ( $D = 1,5$  см)), поміщали в сканер та проводили сканування. Кількісну оцінку яскравості каналів кольору відсканованих міцелярних екстрактів визначали в програмі Adobe Photoshop 7.0.

Умови вилучення та визначення залишкових кількостей міді на ягодах та плодах у роботі розробляли з використанням фунгіциду “Чемпіон” (~77% діючої речовини на основі гідроксиду міді; 30 г препарату розчиняють в 0,5 л води з подальшим розведенням до 8–10 л).

*Методика міцелярно-екстракційного концентрування.* Водні розчини ЦПХ, які містили необхідні компоненти, поміщали в калібровані мірні пробірки об'ємом 10 мл, закріплювали в штативі, занурювали у водяну баню і нагрівали до гомогенізації. Потім розчини охолоджували у водній (льодяній) бані до повного фазового розділення та декантували водну фазу.

**Результати дослідження та їх обговорення.** При охолодженні індивідуальних розчинів ЦПХ утворюється кристалічний осад, об'єм якого зі збільшенням вмісту ПАР зростає. Введення  $H_2Sal$  у нейтральні та слабокислі розчини ЦПХ приводить до утворення малорозчинного асоціату саліцилат аніона з катіоном цетилпіридинію. З іншого боку, введення  $H_2Sal$  у кислі розчини ЦПХ (рН 1) сприяє формуванню в системі компактних рідких катіоноактивних фаз при кімнатній температурі. Такі фази забезпечують ефективне вилучення субстратів, високі коефіцієнти концентрування і були використанні у роботі для міцелярної екстракції комплексу  $Cu$  з ДДТК.

Мідь з ДДТК в інтервалі рН 1–12 дає малорозчинні комплекси жовтого кольору із співвідношенням компонентів  $Cu : ДДТК 1 : 2$  [9]. Максимальний вихід комплексу спостерігається при рН 1,0–3,5, що збігається з умовами формування модифікованої саліциловою кислотою катіонної фази ЦПХ.

У ході дослідження було виявлено здатність цетилпіридиній хлориду стабілізувати колоїдо-хімічний стан розчинів  $Cu - ДДТК$ . Встановлено, що стабілізуюча дія катіонної ПАР пояснюється гальмуванням агрегації нерозчинного у воді комплексу, що підтверджується значним впливом порядку зливання на стан системи. Так, першочергове введення ЦПХ у систему сприяє солубілізації комплексу та запобігає утворенню осаду. З іншого боку, введення катіонної ПАР до утвореного осаду діетилдитіокарбамату міді до стабілізації системи не призводить.

При взаємодії  $Cu$  з ДДТК у присутності ЦПХ спостерігається утворення комплексу жовтого кольору ( $\lambda_{max} = 440$  нм), спектри поглинання якого не змінюються протягом кількох годин (рис. 1). Максимум поглинання розчинів  $Cu - ДДТК$  у присутності ПАР узгоджується

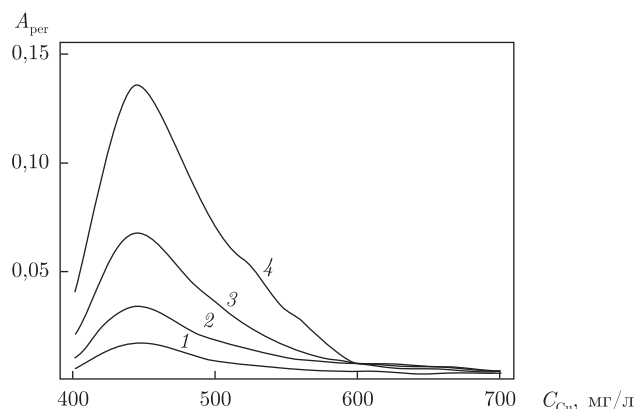


Рис. 1. Спектри поглинання розведених міцелярних екстрактів комплексу Cu — ДДТК.  $C_{\text{ДДТК}} = 8 \cdot 10^{-5}$  моль/л;  $C_{\text{ЦПХ}} = 0,01$  моль/л;  $C_{\text{H}_2\text{Sal}} = 0,01$  моль/л;  $C_{\text{Cu}}$ , моль/л:  $5 \cdot 10^{-6}$  (1),  $1 \cdot 10^{-5}$  (2);  $2 \cdot 10^{-5}$  (3);  $4 \cdot 10^{-5}$  (4); рН 1;  $l = 0,5$  см; розчин порівняння — холоста проба

ся з наведеними в літературі  $\lambda_{\text{max}}$  комплексу в органічних розчинниках [10]. Комплекс Cu — ДДТК кількісно переходить у катіонну міцелярну фазу при одноразовій екстракції.

На підставі отриманих даних розроблено методику визначення міді з попереднім міцелярно-екстракційним концентруванням з подальшим фотометричним, ААС або кольорометричним детектуванням.

*Методика визначення міді.* У мірні пробірки об'ємом 10 мл вносили 1 мл 0,1 моль/л розчину ЦПХ, 2,5 мл 0,04 моль/л саліцилової кислоти, 1,0 мл  $2 \cdot 10^{-3}$  моль/л розчину ДДТК, аліквотну частину аналізованого розчину, встановлювали рН 1  $\text{HNO}_3$ , доводили до мітки дистильованою водою та проводили міцелярно-екстракційне концентрування. Вміст міді в отриманих екстрактах визначали відповідним методом за градууювальним графіком.

*Побудова градууювального графіка.* У 6 мірних пробірок об'ємом 10 мл вносили всі необхідні компоненти в зазначених у методиці кількостях, додавали 0; 0,2; 0,4; 0,9; 1,7 та 2,5 мл робочого розчину міді з концентрацією 15 мг/л та проводили міцелярно-екстракційне концентрування. При фотометричному та ААС детектуванні отримані міцелярні фази об'ємом  $\sim 0,5$  мл розбавляли водою до 2,5 мл та проводили відповідні вимірювання.

При фотометричному детектуванні вимірювали світлопоглинання розведених екстрактів при  $\lambda = 440$  нм у кюветі з  $l = 0,5$  см; розчин порівняння — холоста проба. При кольорометричному визначенні міді міцелярні екстракти переносили у кювету та вимірювали їх характеристики кольору за допомогою сканера при 150 dpi. Найбільш чутливим до зміни вмісту міді виявився В-канал кольору екстракту. При цьому із збільшенням концентрації Cu(II) яскравість В-каналу зменшується. Така залежність найкраще описується експонентою першого порядку типу:  $B = Y_0 + A \cdot \exp(-C/t)$ , де  $Y_0$ ,  $A$ ,  $t$  — параметри регресії,  $C$  — концентрація визначуваного мікрокомпонента. Зазвичай залежність лінеаризують у допоміжних координатах  $\ln(A/(B - Y_0)) - C/t$  [7]. Розроблену методику було апробовано при аналізі модельних розчинів з відомим вмістом міді. Дані табл. 1 демонструють достатню правильність і точність отриманих результатів.

Незважаючи на широкий асортимент органічних пестицидів, мідьвмісні фунгіциди широко застосовуються у сільському господарстві для боротьби з хворобами плодово-ягідних культур. Як правило, діючою речовиною у таких препаратах є гідроокис, хлорокис та сульфат міді. При відсутності дощів на плодах залишається певна кількість міді, яка викликає

ряд захворювань. Тому моніторинг вмісту міді на поверхні овочів та фруктів є доцільним. Здатність ПАР до змивання аналіту використали в роботі при визначенні міді на поверхні винограду.

На прикладі фунгіциду “Чемпіон” у роботі дослідили ефективність змивання залишкових кількостей міді з поверхні ягід різними елюентами ( $H_2Sal$ ,  $HNO_3$ , ЦПХ, ЦПХ –  $H_2Sal$ , ЦПХ –  $HNO_3$ , ЦПХ – ДДТК, ЦПХ – ДДТК– $H_2Sal$  або ЦПХ – ДДТК– $H_2Sal$ – $HNO_3$ ). Ступінь змивання міді елюентом оцінювали як співвідношення кількості змитої міді до кількості міді на поверхні ягоди.

Встановлено, що ступінь змивання міді з поверхні розчином  $H_2Sal$  збільшується із зменшенням кислотності і досягає максимуму при рН 6, що відповідає умовам утворення саліцилату міді, однак не збігається з умовами формування катіонної фази та міцелярної екстракції комплексу  $Cu$  – ДДТК. З цих міркувань досліди по змиванню міді з поверхні винограду проводили при рН 1. Серед досліджених елюентів найкраще показав себе розчин  $HNO_3$  – ЦПХ, який забезпечує практично кількісне змивання міді (табл. 2).

Отримані дані дозволили розробити методику визначення залишкових кількостей міді на поверхні плодово-ягідних культур. Попередньо встановили, що фотометричному та кольорометричному визначенню міді з ДДТК заважає вісмут та 10-разовий надлишок заліза; однак ці метали до складу фунгіцидів на основі міді не входять.

З метою забезпечення максимального коефіцієнта абсолютного концентрування було оптимізовано умови отримання рідких катіоноактивних фаз з об’єму 50 мл. Встановлено, що максимальне стиснення проби ( $K = 50$ ) досягається з розчинів з концентрацією ЦПХ та  $H_2Sal$  0,005 моль/л.

Методика визначення міді на поверхні плодово-ягідних культур. Взятую для аналізу пробу (ягоди, плоди, листя) поміщали у мірний стакан, додавали 50 мл суміші ЦПХ –  $HNO_3$  з концентраціями 0,005 моль/л та 0,1 моль/л відповідно; систему перемішують кілька

Таблиця 1. Результати визначення міді у модельних розчинах

Введено $Cu$ , мг/кг	Знайдено $Cu$ методами		
	спектрофотометрії, мг/кг; Sr	ААС, мг/кг; Sr	кольорометрії, мг/кг; Sr
0,64	0,62 ± 0,04; 0,024	0,62 ± 0,05; 0,037	0,66 ± 0,03; 0,017
1,90	1,93 ± 0,06; 0,013	1,92 ± 0,04; 0,008	1,95 ± 0,05; 0,010
3,17	3,13 ± 0,05; 0,007	3,13 ± 0,06; 0,008	3,15 ± 0,04; 0,005

Примітка.  $C_{ДДТК} = 2 \cdot 10^{-4}$  моль/л;  $C_{ЦПХ} = 0,01$  моль/л;  $C_{H_2Sal} = 0,01$  моль/л; рН 1;  $n = 3$ ,  $p = 0,95$ .

Таблиця 2. Ефективність змивання міді з поверхні винограду

Елюент	Ступінь змивання, %
$H_2Sal$	55
$HNO_3$	Не визн.*
ЦПХ	50
ЦПХ– $H_2Sal$	40
ЦПХ– $HNO_3$	98
ЦПХ–ДДТК	40
ЦПХ–ДДТК– $H_2Sal$	30
ЦПХ–ДДТК– $H_2Sal$ – $HNO_3$	32

Примітка.  $C_{ДДТК} = 2 \cdot 10^{-4}$  моль/л;  $C_{ЦПХ} = 0,01$  моль/л;  $C_{H_2Sal} = 0,01$  моль/л; рН 1;  $V=10$  мл.

\* Через вимушену зміну порядку зливання компонентів отримані міцелярні екстракти були каламутними.



Таблиця 3. Результати визначення залишкових кількостей міді на поверхні винограду

Нанесено Cu, мг/кг	Знайдено Cu методами		
	спектрофотометрії, мг/кг; Sr	ААС, мг/кг; Sr	кольорометрії, мг/кг; Sr
0,69	0,71 ± 0,04; 0,024	0,65 ± 0,09; 0,050	0,68 ± 0,03; 0,018
1,25	1,27 ± 0,06; 0,020	1,21 ± 0,07; 0,022	1,27 ± 0,04; 0,014
2,12	2,15 ± 0,09; 0,018	2,14 ± 0,05; 0,010	2,14 ± 0,06; 0,012

Примітка.  $C_{\text{ДДТК}} = 2 \cdot 10^{-4}$  моль/л;  $C_{\text{ЦПХ}} = 0,01$  моль/л;  $C_{\text{H}_2\text{Sal}} = 0,01$  моль/л; рН 1;  $n = 3$ ;  $p = 0,95$ .

хвилин та видаляють пробу. До отриманого розчину додають 0,238 г  $\text{H}_2\text{Sal}$  і 0,0017 г ДДТК та перемішують на мішалці при нагріванні до повного розчинення компонентів. Розчин поступово охолоджують до кімнатної температури та після фазового розшарування водну фазу декантують. Визначення вмісту міді в екстракті проводять фотометричним, ААС або кольорометричним методами.

Правильність результатів аналізу перевіряли шляхом визначення залишкового вмісту міді на поверхні ягід винограду. Дані табл. 3 показують високу ефективність змивання та надійність визначення мікрокомпонента. Межа виявлення (МВ) міді на поверхні винограду за розробленою методикою з фотометричним детектуванням становить 0,2 мг/кг. У присутності ЦПХ метрологічні характеристики ААС визначення міді покращуються, що сприяє зниженню МВ до 0,01 мг/кг. Зменшення МВ при кольорометричному детектуванні до 0,005 мг/кг досягається за рахунок реалізації в системі високих коефіцієнтів абсолютного концентрування, оскільки необхідності у розбавленні міцелярних екстрактів немає. За простотою і швидкістю виконання та сукупністю метрологічних характеристик методика кольорометричного визначення міді з попереднім міцелярно-екстракційним концентруванням є найкращою з розроблених.

Таким чином, нами показано одночасне використання катіонного ЦПХ для стабілізації колоїдно-хімічного стану розчинів малорозчинної аналітичної форми, для змивання залишків міді з поверхонь та як утворювача фази-колектора. Розроблено гібридну методику визначення міді з попереднім міцелярно-екстракційним концентруванням у рідку міцелярну фазу з фотометричним, ААС та кольорометричним методами детектування.

1. Штыков С. Н. Химический анализ в нанореакторах: основные понятия и применение // Журн. аналит. химии. – 2002. – **57**, № 10. – С. 1018–1028.
2. Kolesnikova E. N., Glukhareva N. A. The influence of an electrolyte on micelle formation in aqueous solutions of sodium monoalkyl sulfosuccinates // Rus. J. Phys. Chem. A. – 2009. – **83**, No 12. – P. 2322–2324.
3. Roy B. K., Mouluk S. P. Functions of hydrotropes (sodium salicylate, proline, pyrogallol, resorcinol and urea) in solution with special reference to amphiphile behaviors // Colloid. and Surfaces A. – 2002. – **203**, No 1–3. – P. 155–166.
4. Kulichenko S. A., Starova V. S. Phase separation in the sodium dodecylsulphate solutions in the presence of salicylic acid // Chem. Pap. – 2010. – **64**, No 1. – P. 98–105.
5. Blas O. J., Paz J. L. P., Méndez J. H. Indirect determination of diethyldithiocarbamate by atomic absorption spectrometry with continuous extraction: application to the determination of the fungicide ziram // J. Anal. At. Spectrom. – 1990. – **5**. – P. 693–696.
6. Иванов В. М., Кочелаева Г. А. Сорбционно-цветометрическое и тест-определение меди в водах // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. – 2001. – **42**, № 2. – С. 103–105.
7. Дмитриенко С. Г., Аляри В. В., Свиридова О. А., Золотов Ю. А. Использование реакций диазотирования и азосочетания с участием пенополиуретана для определения нитрит-ионов с помощью спектроскопии диффузного отражения и цветометрических сканер-технологий // Там же. – 2004. – **45**, № 2. – С. 131–138.

8. Коростелев П. П. Приготовление стандартных растворов для химико-аналитических работ. – Москва: Наука, 1964. – 400 с.
9. Подчайнова В. Н., Симонова Л. Н. Аналитическая химия меди. – Москва: Наука, 1990. – 279 с.
10. Лурье Ю. Ю. Справочник по аналитической химии. – Москва: Наука, 1989. – 448 с.

Київський національний університет  
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 20.01.2012

**М. Г. Щербина, О. В. Костюк, Н. В. Ищенко, С. А. Куличенко**

**Комплексное применение катионного поверхностно-активного вещества для определения остаточных количеств меди на поверхностях**

*Изучено применение цетилпиридиний хлорида для стабилизации коллоидно-химического состояния растворов диэтилдитиокарбамата меди, смывания остаточных количеств меди с анализируемой поверхности и формирования фазы-коллектора при концентрировании. Показано рациональное сочетание катионоактивных мицеллярных фаз со спектроскопическим, атомно-абсорбционным и цветометрическим методами детектирования. Разработанная гибридная методика с предварительным мицеллярно-экстракционным концентрированием в жидкую катионоактивную фазу апробирована при определении остаточных количеств меди на поверхности ягод винограда после их обработки фунгицидом.*

**M. G. Shcherbyna, O. V. Kostyuk, M. V. Ishchenko, S. A. Kulichenko**

**Multipurpose use of cationic surfactant for the determination of copper residual quantities on the surfaces**

*The application of cetylpyridinium chloride for the stabilization of the colloid-chemical state of copper diethyldithiocarbamate solutions, the flushing of residual amounts of copper from the analyzed surface, and the creation of a phase-collector is investigated. The rational combination of cationic micellar phases with spectrophotometric, atomic absorption, and colorimetric detection is shown. The hybrid technique with the previous micellar extraction preconcentrating into a liquid cationic phase for the determination of residual amounts of copper on the grape surface after a fungicide treatment is suggested.*



УДК 616-006.68:615.014.41:57.085.1

© 2012

Академік НАН України А. М. Гольцев, О. В. Сафранчук,  
М. О. Бондарович, М. В. Останков, Н. М. Бабенко,  
Ю. О. Гаєвська, О. В. Челомбітько

## Методичні підходи до стабілізації структурного і функціонального станів кріоконсервованих клітин аденокарциноми Ерліха

*Запропоновано схему і відпрацьовано методичний підхід щодо отримання стабілізованої культури пухлинних клітин аденокарциноми Ерліха (АКЕ) in vivo після кріоконсервування з певними структурними та функціональними характеристиками. На підставі оцінки репертуару мембранних структур та потенціалу самопідтримки доведено, що процедура стабілізації клітин АКЕ повинна складатися як мінімум з трьох етапів їх культивування по 7 діб. Збільшення кількості етапів культивування АКЕ не змінює ні фенотипічних, ні структурних характеристик стовбурових пухлинних клітин різного ступеня диференціювання.*

На сьогодні онкологічні захворювання посідають друге місце після серцево-судинних зі смертності населення у світі. Класичними і найпоширенішими в клінічній практиці методами лікування злоякісних новоутворень є хіміо- і променева терапія як самостійні підходи або в комплексі з хірургічними втручаннями [1]. Залежно від ряду умов (стадія захворювання, локалізація пухлини та ін.) кожний з обраних методів має різний ступінь ефективності. Значними проблемами при проведенні протипухлинної терапії є дифузний, а не “локалізований” розподіл протипухлинних агентів та неадекватні концентрації лікарських засобів, які досягають пухлини.

Розробка різних терапевтичних заходів лікування онкопатології вимагає апробації їхньої дії в адекватних експериментальних умовах. У випадку онкозахворювань такою моделлю є аденокарцинома Ерліха (АКЕ) — лінія недиференційованих клітин раку молочної залози мишей, що перевивається *in vivo* [2]. Розвиток асцитної форми АКЕ носить стадійний характер, що включає фази високої та низької проліферативної активності клітин із накопиченням їх у перитонеальній порожнині (ПП) експериментальних тварин.

Для підтримки клітин АКЕ як постійної лінії можна використовувати періодичне перевивання культури *in vivo*. Однак у цьому випадку не виключене порушення генетичного

профілю лінії клітин, що перевивається. Так, на мезенхімальних стовбурових клітинах показано, що інтенсивне (екстенсивне) культивування пошкоджує їхню функціональну активність і надає їм виражені ознаки старіння і/або апоптозу [3].

Ефективним методом зберігання клітин АКЕ є кріоконсервування [4]. Проте на багатьох біологічних об'єктах показано, що після кріоконсервування в клітинах розвиваються нелетальні ушкодження, що викликає тимчасове порушення їхнього функціонального стану. Це супроводжується зміною мембранного рецепторного репертуару клітин, спрямованості їхнього диференціювання, інгібіцією проліферації, зниженням здатності розпізнавати мікрооточення і розселятися в ньому тощо [5].

Особливої уваги заслуговує вплив факторів кріоконсервування на стовбурові пухлинні клітини (СПК), які є нечисленною популяцією малодиференційованих клітин з потенціалом необмеженої самопідтримки [6]. СПК є головними структурними одиницями онкопроцесу та здатні не тільки формувати первинні злоякісні сайти, але й відповідати за підтримку росту та метастазування пухлини при злоякісних новоутвореннях мозку, молочної залози, простати, підшлункової залози, гемопоетичної системи тощо [7, 8]. Агресивність цих клітин обумовлена їхньою здатністю продукувати ауто- і паракринні цитокіни, хемокіни й ангіогенні фактори. Саме СПК є стійкими до хіміо- і променевої терапії, що і викликає рецидиви захворювання після їхнього проведення [9, 10].

Враховуючи успіхи з ідентифікації СПК за фенотиповими і деякими іншими характеристиками, робляться спроби керування станом СПК до і після проведення тих або інших видів терапії. СПК як пухлиноіндукуючим попередникам притаманна експресія широкого спектра імунофенотипічних маркерів. Для СПК солідних пухлин характерними є, наприклад, маркери CD44, CD133, CD24, ESA (epithelial surface antigen) та ін., що дають можливість виявляти їх у загальній популяції клітин [11]. Крім суто маркерної фенотипічної одиниці, кожна з цих структур реалізує важливе навантаження як рецептор комунікаційного і метаболічного потенціалу СПК, а також дозволяє оцінити ступінь їхнього диференціювання [10]. Оцінка рівня кількісної експресії молекули додає клітині визначений функціональний статус [12]. Наприклад, тільки клітини з високою щільністю CD44 молекул ідентифікуються як CD44<sup>hi</sup>, мають усі ознаки СПК [11, 13]. Висока канцерогенність CD44<sup>hi</sup> клітин підтверджується формуванням нової пухлини усього десятима такими клітинами, що в 10–50 разів перевищує канцерогенність пухлинних попередників іншого рівня диференціювання [14].

Використання технологій фенотипічного маркування пухлинних клітин-попередників, їхнього потенціалу самопідтримки і диференціювання, дає змогу не тільки ідентифікувати стадії, динаміку розвитку та інвазивність процесу, але й оцінити ступінь ревертації структурно-функціональних показників цих клітин після кріоконсервування [15].

Метою дослідження було стабілізувати в системі *in vivo* культуру клітин АКЕ після зберігання в низькотемпературному банку при  $-196\text{ }^{\circ}\text{C}$ , тобто довести їхні структурні і функціональні показники до рівня, який притаманний пухлинним клітинам цієї форми до кріоконсервування.

**Матеріали і методи.** Експерименти проводили на 8-місячних самках мишей лінії BALB/c масою 16–18 г, що утримувалися в стандартних умовах віварію Інституту проблем кріобіології і кріомедицини НАН України (Харків). Принципи проведення експериментів відповідали схваленим Національним конгресом з біоетики (Київ, 2001) та положенням “Європейської конвенції про захист хребетних тварин, що використовуються для експериментальних і інших наукових цілей” (Страсбург, 1986).

*Зберігання суспензії клітин АКЕ.* Як первинну культуру використовували кріоконсервовані клітини АКЕ, що зберігалися в низькотемпературному банку Інституту проблем кріобіології і кріомедицини НАН України при  $-196\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Кріоконсервування суспензії клітин АКЕ здійснювали в пластикових ампулах (“Nunc”, США) без застосування класичних кріопротекторів у асцитичній рідині [4] в концентрації  $1 \cdot 10^7$  клітин/мл об’ємом 1,8 мл на заморожувачі УОП-06 (СКТБ з ОВ ІПКіК НАН України). Умови кріоконсервування: швидкість охолодження  $1\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{хв}$  до  $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$ , від  $-80$  до  $-196\text{ }^{\circ}\text{C}$  зі швидкістю  $300\text{--}400\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{хв}$ . Зразки відігрівали на водяній бані при  $40\text{--}41\text{ }^{\circ}\text{C}$  протягом  $45\text{--}50$  с при постійному шутелюванні ампул до зникнення твердої фази [2].

*Стабілізація АКЕ.* Відігріті клітини АКЕ “стабілізували” шляхом перевивання *in vivo* по 7 діб декілька разів, доки вони не набували структурно-функціональних ознак нативної культури [15]. Перед кожним перевиванням проводили атестацію клітин, що були культивовані: визначали об’єм накопиченої в ПП рідини (мл), підраховували абсолютну кількість ядровмісних клітин АКЕ у ній, оцінювали їхні імунофенотипічні характеристики та аналізували функціональний стан, тобто потенціал самопідтримки СПК різного рівня диференціювання.

*Культивування клітин АКЕ в системі in vivo.* Суспензію клітин АКЕ вводили внутрішньоочеревинно в дозі  $3 \cdot 10^6$ /мишу в об’ємі 0,3 мл і культивували протягом 7 діб в ПП. До необхідної концентрації асцитичну рідину доводили фізіологічним розчином (“Черкаси-фарма”, Україна). Асцит із ПП одержували шприцом через голку № 10, попередньо вводячи мишей у легкий ефірний наркоз.

*Оцінка імунофенотипічних характеристик клітин АКЕ.* Для проведення такої атестації були використані моноклональні антитіла (“BD Pharmingen”, США) до CD44 (кон’юговані з FITC, № 553 133 за каталогом), а також CD24 (кон’юговані з PE, за каталогом № 553 262). За допомогою цих моноклональних антитіл були ідентифіковані: загальна фракція клітин з фенотипом  $\text{CD44}^+/\text{CD24}^-$ , а також  $\text{CD44}^{\text{hi}}$  — клітини, які входять до її складу і характеризуються найбільшою флуоресценцією за логарифмічною шкалою, з інтенсивністю сигналу  $10^4$ .

Імуноглобуліни тих самих ізотипів (за каталогом № 553988 і № 553989, “BD Pharmingen”, США) були використані як контроль. Концентрацію досліджуваних субпопуляцій клітин у зразках АКЕ визначали на проточному цитофлуориметрі FACS Calibur (“Becton Dickinson”, США). Для мінімізації помилок у пробах аналізували 10000 подій. Облік і аналіз результатів здійснювали за допомогою програми WinMDI 2.9.

Оцінка середньої інтенсивності флуоресценції (СІФ) є важливим компонентом аналізу стану трансформованих клітин при діагностиці онкозахворювань [12]. СІФ виміряли за логарифмічною шкалою інтенсивності сигналу в діапазоні від 64 до 1024 каналу і виражали в умовних одиницях, що відповідали середньому каналу максимального випромінювання маркера. Ступінь експресії  $\text{CD44}^{\text{hi}}$  маркера за СІФ визначали на вказаному проточному цитофлуориметрі.

*Оцінка функціонального стану* (проліферативного потенціалу) клітин АКЕ. Для оцінки проліферативного потенціалу загальної популяції АКЕ, а також реплікативної активності різного рівня диференціювання СПК обчислювали час подвоєння кількості цих клітин  $Td$  (від англ. Time doubling) за формулою  $Td = T(\log N_f - \log N_0) \cdot 3,3219$ , де  $T$  — час культивування клітин (год); 3,3219 — коефіцієнт переведення  $\log$  в  $\ln$ ;  $N_0$  — початкова кількість клітин;  $N_f$  — кінцева кількість клітин.

*Статистичний аналіз.* Отримані результати статистично обробляли за методом Стьюдента в модифікації Фішера із застосуванням комп'ютерної програми MS Excel.

**Результати та їх обговорення.** Відомо, що після повернення клітин АКЕ в умови нормотермії зі стану глибокого і помірного холододового анабіозу в них розвиваються нелегальні ушкодження у вигляді зворотної інгібіції проліферативної активності пухлинних клітин і їхнього метаболізму [4]. Однак характер впливу факторів кріоконсервування на стан СПК у складі гетерогенної популяції клітин пухлини залишається маловивченим. Показники структурно-функціонального стану СПК мають низку притаманних їм характеристик, незважаючи на те, що вони варіюють у пухлинах різної локалізації та різного генезу [8].

Основні біомаркери СПК представлені як фенотипічні поверхневі (мембранні) молекули. Найбільшої уваги заслуговує CD44 молекула (CD-44 — насамперед рецептор до гіалуронової кислоти), яку експресують клітини багатьох типів пухлин, зокрема раку товстого кишечника, молочної залози, простати [6, 10]. При цьому тільки частина цих клітин, поряд з відсутністю експресії молекули CD24, гіперекспресує CD44-маркер і ідентифікується як CD44<sup>hi</sup>, виявляючи всі ознаки СПК: здатність до самопідтримки, швидкого формування пухлин [6]. Проте в CD44<sup>+</sup>/24<sup>-</sup> клітинах визначено високий рівень експресії проінвазивних генів Sox-2, Oct-4, Nanog, Vmi-1. Саме ці клітини також здатні формувати в організмі реципієнтів пухлини, але якщо CD44<sup>hi</sup> — при введенні в дозі  $1 \cdot 10^2$ , то CD44<sup>+</sup>/24<sup>-</sup> — у значно більшій дозі. Іншими словами, для кожної з цих популяцій пухлинних попередників існує різна “критична” маса щодо індукції пухлинного росту.

Встановлено (табл. 1), що нативні клітини АКЕ (контроль) формують в ПП об'єм асцитичної рідини не менш 3 мл із загальним вмістом клітин  $3,5 \cdot 10^8$ . При аналізі в загальному пулі АКЕ клітин з фенотипічними маркерами СПК показано, що концентрація CD44<sup>+</sup>/24<sup>-</sup> клітин становить  $(4,80 \pm 0,33)\%$ , CD44<sup>hi</sup> —  $(0,38 \pm 0,017)\%$ . При цьому час подвоєння зазначених клітинних популяцій повинен досягати таких значень: для CD44<sup>+</sup>/24<sup>-</sup> клітин —  $(2,8 \pm 0,16)$  год, а для CD44<sup>hi</sup> —  $(2,9 \pm 0,17)$  год [15].

Як видно з табл. 1, динаміка показників, що вивчалися протягом усього строку культивування АКЕ, мала свої особливості. Якщо об'єм асцитичної рідини в ПП та вміст найбільш інвазивної популяції CD44<sup>hi</sup> серед клітин АКЕ мав тенденцію збільшуватися протягом усього строку спостереження, то загальний вміст клітин АКЕ в ПП досягав максимальних значень, істотно перевищуючи контрольні показники, після других 7 днів культивування зі значним зменшенням та стабілізацією їхньої кількості до рівня нативної культури на треті 7 днів культивування. Дуже важливо, що подібна динаміка була відзначена і для популяції більш диференційованих CD44<sup>+</sup>/24<sup>-</sup> клітин.

Таблиця 1. Зміна структурно-функціональних характеристик АКЕ протягом стабілізації ( $M \pm m, n = 5$ )

Показник	Строки стабілізації культури			Нативна культура (контроль)
	перші 7 днів	другі 7 днів	треті 7 днів	
Об'єм асцитичної рідини, мл	$1,5 \pm 0,11^*$	$3,1 \pm 0,22$	$3,5 \pm 0,25$	$3,5 \pm 0,24$
Загальний вміст клітин в ПП, $n \cdot 10^8$	$1,2 \pm 0,08^*$	$7,65 \pm 0,05^*$	$3,5 \pm 0,65$	$3,5 \pm 0,71$
Вміст CD44 <sup>+</sup> /24 <sup>-</sup> клітин, %	$5,02 \pm 0,35^*$	$7,07 \pm 0,4^*$	$4,10 \pm 0,33$	$4,80 \pm 0,33$
Вміст CD44 <sup>hi</sup> клітин, %	$0,03 \pm 0,002^*$	$0,07 \pm 0,005^*$	$0,36 \pm 0,02$	$0,38 \pm 0,017$
СІФ CD44 <sup>hi</sup> клітин, у. о.	$7465 \pm 525^*$	$8036 \pm 562^*$	$9096 \pm 637$	$9110 \pm 637$
Час подвоєння CD44 <sup>+</sup> /24 <sup>-</sup> клітин, год	$7,0 \pm 0,98^*$	$3,9 \pm 0,27^*$	$3,1 \pm 0,23$	$2,8 \pm 0,16$
Час подвоєння CD44 <sup>hi</sup> клітин, год	$10,8 \pm 0,76^*$	$6,1 \pm 0,43^*$	$3,2 \pm 0,22$	$2,9 \pm 0,17$

\* Результати мають достовірні відмінності зі стабілізованою культурою,  $p < 0,05$ .

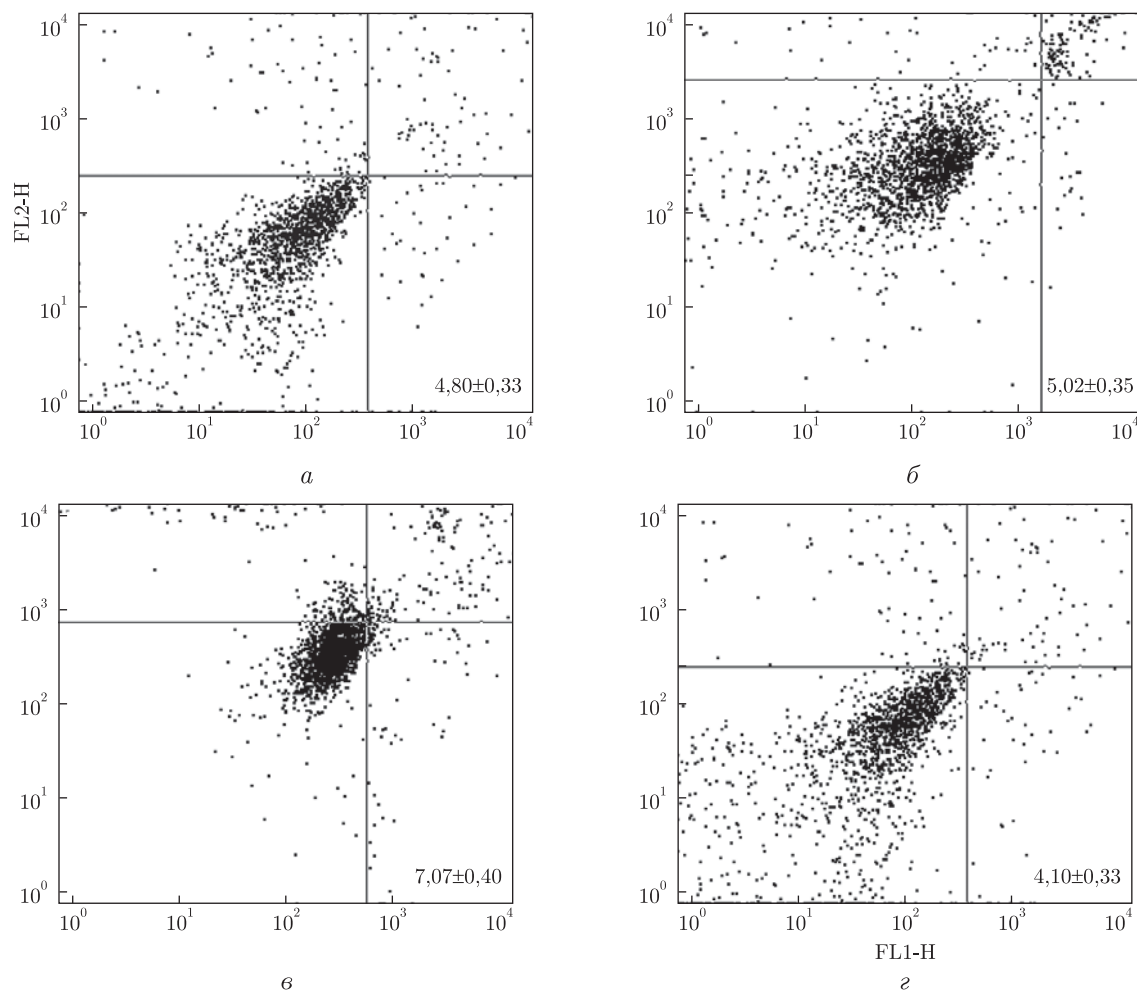


Рис. 1. Результати цитофлуориметричної оцінки вмісту  $CD44^+/24^-$  клітин: *a* — нативної культури; *б* — після перших 7 діб; *в* — після других 7 діб; *г* — після третіх 7 діб стабілізації АКЕ

Після перших 7 діб стабілізації АКЕ загальний вміст клітин у ПП тварин становив тільки  $(1,2 \pm 0,08) \cdot 10^8$  клітин в об'ємі 1,5 мл (див. табл. 1). При цьому в загальній популяції АКЕ концентрація більш диференційованих клітин-попередників з фенотипом  $CD44^+/24^-$  становила  $(5,02 \pm 0,35)\%$  (рис. 1, *б*), а менш диференційованих —  $CD44^{hi}$  —  $(0,03 \pm 0,002)\%$  (рис. 2, *б*). Протягом перших 7 діб культивування АКЕ показник  $Td$  був досить подовженим відносно показників нативної культури, а саме для  $CD44^+/24^-$  клітин він становив  $(7,0 \pm 0,98)$  год (див. табл. 1), а для  $CD44^{hi}$  —  $(10,8 \pm 0,76)$  год. Саме різниця в цих показниках є важливою для подальшого культивування протягом других 7 діб.

Після других 7 діб культивування практично всі показники АКЕ значно змінювалися і мали такі характеристики: загальний вміст клітин у ПП —  $(7,65 \pm 0,05) \cdot 10^8$  клітин в об'ємі 3,1 мл, концентрація клітин з фенотипом  $CD44^+/24^-$  —  $(7,07 \pm 0,4)\%$  (див. рис. 1, *в*),  $CD44^{hi}$  —  $(0,07 \pm 0,005)\%$  (див. рис. 2, *в*). Час подвоєння для обох популяцій скоротився до  $(3,9 \pm 0,27)$  і  $(6,1 \pm 0,43)$  год відповідно (табл. 2). Треба зауважити, що різниця значень  $Td$  між субпопуляціями СПК не змінюється і становить 3 год, як на перші, так і на другі 7 діб культивування.

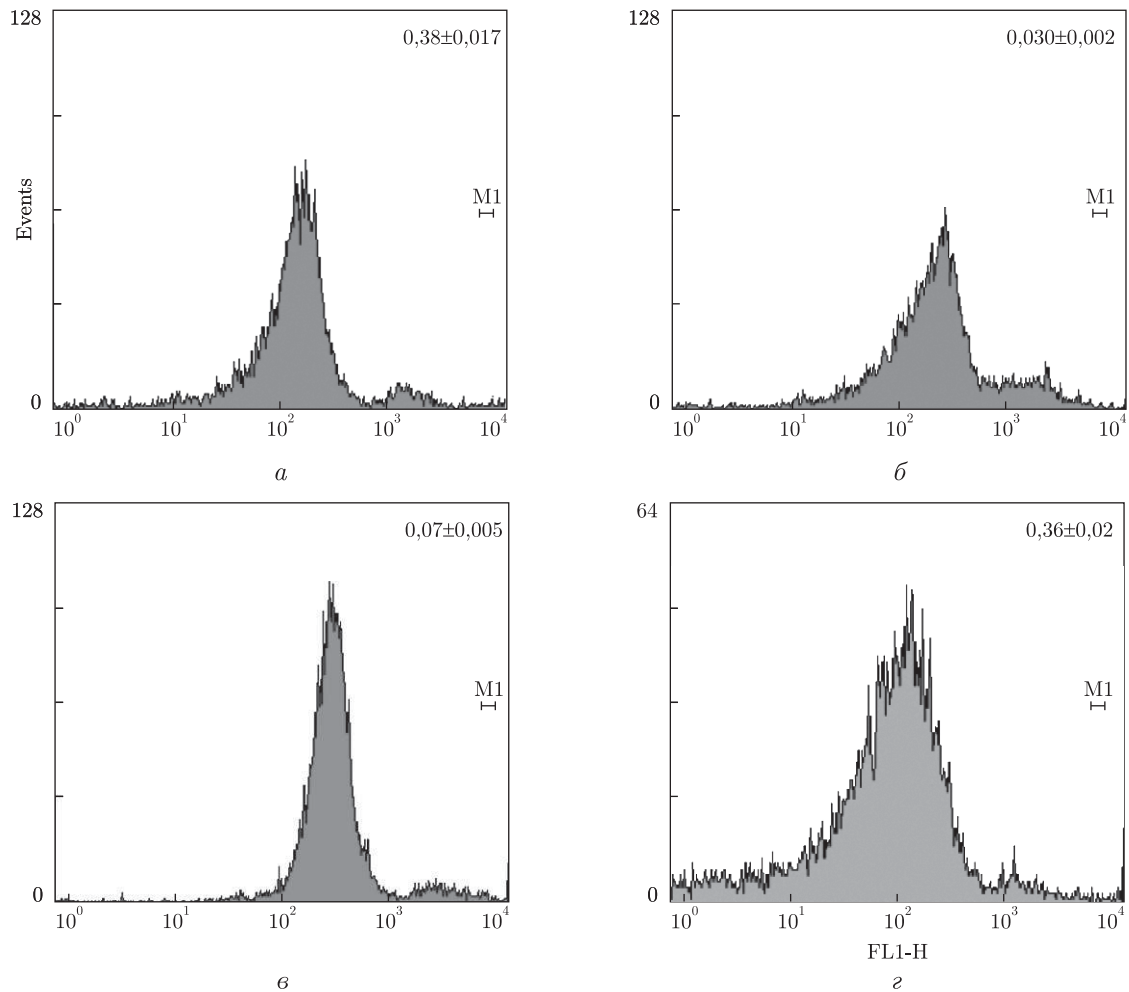


Рис. 2. Результати цитофлуориметричної оцінки вмісту  $CD44^{hi}$  клітин: *a* — нативної культури; *б* — після перших 7 діб; *в* — після других 7 діб; *г* — після третіх 7 діб стабілізації АКЕ. M1 — зона високого рівня експресії маркера

Після третіх 7 діб стабілізації показники вже істотно наближалися до контрольних значень [15]. Загальний вміст клітин у ПП ( $3,5 \cdot 10^8$  клітин) і об'єм асцитичної рідини (3,5 мл) зовсім не відрізнялися від контролю. Те саме можна сказати і про клітини з  $CD44^+/24^-$  ( $(4,10 \pm 0,33)\%$ ) (див. рис. 1, *г*) і  $CD44^{hi}$  ( $(0,36 \pm 0,02)\%$ ) маркерами (див. рис. 2, *г*). Найбільш важливим є той факт, що час подвоєння  $CD44^+/24^-$  та  $CD44^{hi}$  клітин практично збігався не тільки з контрольними значеннями, а і між собою.

Не виключено, що саме розходження в ступені експресії зазначених маркерів СПК на різних стадіях розвитку пухлини і обумовлює їхню резистентність до проведених терапевтичних заходів [12]. Відомо, що після криоконсервування рецепторний репертуар багатьох клітин змінюється за рахунок “шедингу” мембранних структур у відповідь на дію фізико-хімічних факторів кровопливу [5]. Як наслідок, може змінюватися здатність клітин до комунікації з мікрооточенням як у системі *in vivo*, так і *in vitro* [5, 15], тобто їхня функціональна активність. На цій підставі обов'язковим компонентом оцінки стану клітин АКЕ, а саме клітин з  $CD44^{hi}$  маркером на етапах стабілізації, були вибрані саме показники СІФ



(див. табл. 1). Як видно, вже після перших 7 днів стабілізації, незважаючи на низький відсоток вмісту CD44<sup>hi</sup> клітин (у 10 разів менший, ніж у контролі), у загальній популяції ступінь експресії маркера CD44 був досить високим, але достовірно нижчим, ніж у контролі ( $7465 \pm 525$  і  $9110 \pm 637$  відповідно,  $p < 0,05$ ). Після других 7 днів цей показник істотно наближався до показників контролю ( $8036 \pm 562$  і  $9110 \pm 637$ ,  $p < 0,05$ ), продовжуючи зростати до третіх 7 днів стабілізації.

Таким чином, отримані дані свідчать про те, що після криоконсервування клітини АКЕ за своїми структурно-функціональними характеристиками значно відрізняються від нативних клітин. Для повернення криоконсервованих клітин АКЕ до стану нативних (за обраними параметрами) необхідно провести процедуру їхньої стабілізації, яка складається як мінімум з трьох етапів культивування по 7 днів. У стабілізованій таким чином культурі АКЕ кількість клітин з маркерами, які притаманні СПК (CD44<sup>+</sup>/24<sup>-</sup> і CD44<sup>hi</sup>), не відрізнялась від відповідних значень нативних АКЕ [15]. З метою підтвердження подальшої незмінності показників протягом наступних двох тижнів культивування була проведена додаткова їхня атестація, яка встановила, що увесь спектр показників АКЕ залишався стабільним (дані не наведено). Тільки у цьому випадку можна вважати що після трикратного 7-добового послідовного культивування культура АКЕ є стабілізованою після криоконсервування і придатною для подальшого використання, в тому числі атестації впливу різних форм протипухлинних агентів.

Отже, на підставі результатів дослідження розроблено схему і відпрацьовано методичний підхід отримання стабілізованої культури клітин АКЕ після криоконсервування з певними структурно-функціональними характеристиками з урахуванням гетерогенного складу популяції пухлинних клітин.

1. Новик А. В., Моусеєнко В. М. Теоретические предпосылки адьювантной терапии злокачественных опухолей // *Практ. онкология*. – 2007. – 8, № 3. – С. 109–117.
2. Эммануэль Н. М. Кинетика экспериментальных опухолевых процессов. – Москва: Наука, 1977. – 419 с.
3. Cognet P. A., Minguell J. J. Phenotypical and functional properties of human bone marrow mesenchymal progenitor cells // *J. Cell Physiol*. – 1999. – 181. – P. 67–73.
4. Федец О. И. Биоэнергетика и пролиферативная активность криоконсервированных клеток аденокарциномы Эрлиха: Автореф. дис. ... канд. биол. наук. – Харьков, 1987. – 36 с.
5. Goltsev A. N., Babenko N. N., Dubrava T. G. et al. Modification of the state of bone marrow hematopoietic cells after cryopreservation // *Intern. J. Refrigeration*. – 2006. – 29, No 3. – P. 358–367.
6. Al-Hajj M., Wicha M. S., Benito-Hernandez A. et al. Prospective identification of tumorigenic breast cancer cells // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. – 2003. – 100, No 7. – P. 3983–3989.
7. Бондарович Н. А., Гольцев К. А. Определение содержания CD44<sup>+</sup> CD24<sup>-</sup> клеток как дополнительный критерий оценки эффективности превентивной терапии онкопатологии в эксперименте // *Пробл. криобиологии*. – 2008. – 18, № 1. – С. 5–9.
8. Prince M. E., Sivanadan R., Kaczorowski A. et al. Identification of a subpopulation of cells with cancer stem cell properties in head and neck squamous cell carcinoma // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. – 2007. – 104, No 3. – P. 973–978.
9. Erato A., Ricci-Vitiani L., Zeuner A. et al. Chemotherapy resistance of glioblastoma stem cells // *Cell Death Differ*. – 2006. – 13, No 7. – P. 1238–1241.
10. Nakshatri H. Radiation resistance in breast cancer: are CD44<sup>+</sup>/CD24<sup>-</sup>/proteasome<sup>low</sup>/PKH26<sup>+</sup> cells to blame? // *Ibid*. – 2010. – 12, No 2. – P. 105.
11. Fillmore C., Kuperwasser C. Human breast cancer stem cell markers CD44 and CD24: enriching for cells with functional properties in mice or in man? // *Breast Cancer Res*. – 2007. – No 3. – P. 303–306.
12. Гольцев А. Н., Сафранчук О. В., Бондарович Н. А. и др. Влияние факторов криоконсервирования на уровень экспрессии маркеров стволовых раковых клеток в аденокарциноме Эрлиха // *Биол. вестник*. – 2009. – 13, № 1–2. – С. 13–16.

13. Abraham B. K., Fritz P., McClellan M. et al. Prevalence of CD44<sup>+</sup>/CD24<sup>-</sup>/low cells in breast cancer may not be associated with clinical outcome but may favour distant metastasis // Clin. Cancer Res. – 2005. – **11**, No 3. – P. 1154–1159.
14. Hermann P. C., Huber S. L., Herrler T. et al. Distinct populations of cancer stem cells determines tumor growth and metastatic activity in human pancreatic cancer // Cell Stem Cell. – 2007. – **1**, No 3. – P. 313–323.
15. Гольцев А. М., Сафранчук О. В., Бондарович М. О. та ін. Зміна кріолабільності стовбурових пухлинних клітин залежно від фази росту аденокарциноми // Фізіол. журн. – 2011. – **57**, № 4. – С. 68–76.

Інститут проблем кріобіології  
і кріомедицини НАН України, Харків

Надійшло до редакції 21.02.2012

Академик НАН України **А. Н. Гольцев, О. В. Сафранчук, Н. А. Бондарович, М. В. Останков, Н. Н. Бабенко, Ю. А. Гаевская, О. В. Челомбитко**

### **Методические подходы стабилизации структурного и функционального состояний криоконсервированных клеток аденокарциномы Эрлиха**

*Предложена схема и отработан методический подход получения стабилизированной культуры опухолевых клеток аденокарциномы Эрлиха (АКЭ) in vivo после криоконсервирования с определенными структурными и функциональными характеристиками. На основании оценки репертуара мембранных структур и потенциала самоподдержания доказано, что процедура стабилизации клеток АКЭ должна складываться как минимум из трех этапов их культивирования по 7 суток. Увеличение числа этапов культивирования АКЭ не изменяет ни фенотипических, ни структурных характеристик стволовых опухолевых клеток разной степени дифференцировки.*

Academician of the NAS of Ukraine **A. N. Goltsev, O. V. Safranchuk, N. A. Bondarovich, M. V. Ostankov, N. N. Babenko, Yu. A. Gaevskaya, O. V. Chelombitko**

### **Methodological approaches to the stabilization of structural and functional states of Ehrlich adenocarcinoma cryopreserved cells**

*The scheme is proposed, and a methodological approach to the production of a stabilized culture of Ehrlich adenocarcinoma (EAC) tumor cells in vivo having certain structural and functional characteristics after cryopreservation is worked out. By assessment of the membrane structure repertoire and the self-supporting potential, it is demonstrated that the EAC cell stabilization procedure should consist of at least three stages of their cultivation each of 7 days. An increase in the number of EAC cultivation stages doesn't change phenotypic or structural characteristics of stem tumor cells of different differentiation degrees.*

В. М. Гришко, О. М. Піскова

## Процеси пероксидного окиснення ліпідів та зміни кількісного і якісного складу поверхневих ліпідів у *Populus italica* (Du Roi) Moench, *Populus deltoides* Marsh. та *Aesculus hippocastanum* L. за різного рівня забруднення важкими металами

(Представлено академіком НАН України Д. М. Гродзинським)

В умовах промислового забруднення сполуками важких металів в обидві фази морфогенезу листка цинк, плюмбум та кадмій найінтенсивніше накопичуються фотосинтезуючими органами *Populus italica*, а нікель — *Populus deltoides*, тоді як *Aesculus hippocastanum* найменше акумулює зазначені елементи. Незважаючи на такий характер акумуляції, у *P. italica* встановлено найнижчий рівень процесів пероксидації, на відміну від *P. deltoides*, у якого він найвищий (зростав до 6 разів порівняно з контролем). За дії промислових викидів у *P. italica* виявлено збільшення кількості всіх компонентів поверхневих ліпідів кутикули, максимально для фосфоліпідів, дигліцеридів і ефірів стеринів — до 5%, тоді як у *A. hippocastanum* відзначено тенденцію щодо зниження вмісту дигліцеридів і стеринів. Лише у *P. deltoides*, на відміну від інших видів, в стресових умовах з'являються тригліцериди і зникають дигліцериди, що свідчить про певні порушення гідрофобності шару кутикули.

У великих промислових центрах України концентрація виробництв на обмежених територіях біля джерел сировини та енергії, постійне нарощування їх виробничих потужностей здебільшого призводить до злиття локальних емісійних зон та формування стійкого регіонального поля забруднення хімічними токсичними сполуками, що насамперед впливає на рослинність. Забруднення довкілля в регіональних масштабах прискорює процеси деградації фітоценозів і трансформації флори, створює значні труднощі в озелененні територій і санітарно-захисних зон промислових виробництв [1]. Саме тому вивчення перебігу фізіолого-біохімічних процесів у рослинних організмах за дії стресорів є досить актуальним для з'ясування різноманітних механізмів адаптації рослин в умовах навколишнього середовища, що постійно змінюється.

Виходячи з вищесказаного, ми вважали доцільним дослідити особливості перебігу процесів пероксидного окиснення ліпідів, зміни вмісту та складу поверхневих ліпідів за різних темпів акумуляції цинку, нікелю, плюмбуму і кадмію в листках деревних рослин.

Об'єктами досліджень були тополя пірамідальна (*Populus italica* (Du Roi) Moench), тополя канадська (*Populus deltoides* Marsh.) та гіркокаштан звичайний (*Aesculus hippocastanum* L.) другої вікової групи, що зростають на промайданчику ЗАТ "Криворізький суриковий завод" (у зоні сильного і слабого забруднення) та у дендрарії Криворізького ботанічного саду НАН України, який прийнятий за умовний контроль. З п'яти дерев кожного виду відбиралися листки із середини крони південно-західної експозиції у фази повного відособлення листка та на 5–10-ту добу фази завершення росту листка.

Вміст полютантів у рослинному матеріалі визначали на атомно-адсорбційному спектрофотометрі С-115 (Україна) за загальноприйнятими методами [2]. Аналіз вмісту ТБК-активних продуктів проводили на спектрофотометрі СФ-2000 (Росія) за Камишніковим [3]. Вміст білка в гомогенатах обчислювали методом Грінберга за реакцією з бромфеноловим синім [4]. Екстракцію поверхневих ліпідів з асиміляційних органів здійснювали за модифікованим методом Блайя і Дайєра [5]. Тонкошарову хроматографію (ТШХ) поверхневих ліпідів проводили за методом Кейтса [6]. Повторність у межах окремого варіанту досліджу становила 10 рослин, аналітична повторність 4-кратна. Статистичну обробку експериментальних даних виконували за загальноприйнятими методами параметричної статистики при 95%-му рівні значущості за Доспеховим [7].

Визначення вмісту важких металів в асиміляційних органах інтактних деревних рослин показало, що як у фазу повного відособлення листка, так і на 5–10-ту добу фази завершення росту листка плюмбум, який належить до групи дуже фітотоксичних металів [8], акумулювався найінтенсивніше (табл. 1). Його максимальний вміст (0,78 та 1,37 мкг/г сирі речовини відповідно) був зафіксований у листках *P. italica*, тоді як у листках *P. deltooides* найбільше акумулювався цинк. Натомість, у фотосинтезуючих органах *A. hippocastanum* зазначених вище елементів акумулювалось у 3–5,5 раза менше. До того ж зазначимо, що кількість кадмію в усіх видів була практично однаковою і коливалася в межах від 0,05 до 0,07 мкг/г сирі речовини в обидві фази морфогенезу листка. Аналіз отриманих даних свідчить про те, що за умов контролю темпи транслокації важких металів у листки *A. hippocastanum* були найменшими з-поміж досліджених видів, що може розглядатись як його видоспецифічна особливість.

Узагальнені розрахунки концентрації токсикантів у листках деревних рослин в умовах забруднення промисловими викидами ЗАТ “Криворізький суриковий завод” (див. табл. 1) виявили, що найбільше серед усіх досліджених полютантів накопичувався цинк, який належить до класу високонебезпечних сполук [8]. Так, у фазу повного відособлення листка і на 5–10-ту добу фази завершення росту листка максимальна його кількість акумулювалася *P. italica* і в 13 та 23 рази відповідно перевищувала даний показник у інтактних рослин. Дещо нижчий вміст цинку (4,26 та 7,81 мкг/г сирі речовини на першому та другому етапі дослідження) спостерігався в асиміляційних органах *P. deltooides*, тоді як в листках *A. hippocastanum* його концентрація виявилася найнижчою, як і плюмбуму.

У тополь за сильного рівня забруднення досить інтенсивно відбувалася акумуляція нікелю, що підтверджується високими абсолютними значеннями його вмісту в обидві фази морфогенезу листка (див. табл. 1). Найбільший його рівень відмічено в листках *P. deltooides* — у 5 разів вище за відповідний показник у контрольних рослин. Принагідно зазначимо, що, на думку Крамера, одним з механізмів, який забезпечує високу толерантність рослин до нікелю є вакуолярна локалізація його комплексів з органічними кислотами, завдяки чому він вилучається з активного метаболізму в клітині [9].

Серед вивчених видів у *P. italica* в умовах забруднення максимально інтенсивно акумулювався плюмбум, про що свідчить зростання у 3–5 разів його концентрації порівняно з інтактними рослинами у різні фази розвитку листка. До того ж, як видно з табл. 1, у листках цього виду найбільше концентрувався кадмій і цинк, що, ймовірно, пов'язано з ефектами синергізму між іонами кадмію, цинку та плюмбуму [1].

Відомо, що токсична дія більшості важких металів викликає розвиток оксидативного стресу і супроводжується різноманітними перебудовами метаболізму рослин, обумовленими як безпосереднім окисненням ліпідів мембран, так і накопиченням продуктів пероксидації,

Таблиця 1. Вміст деяких важких металів у листках деревних рослин, мкг/г сирої речовини

Пробна ділянка	Zn		Ni		Pb		Cd	
	$M \pm m$	$t_{st}$	$M \pm m$	$t_{st}$	$M \pm m$	$t_{st}$	$M \pm m$	$t_{st}$
<i>Populus italica</i>								
Умовний контроль	$0,45 \pm 0,009$	—	$0,69 \pm 0,004$	—	$0,78 \pm 0,02$	—	$0,05 \pm 0,01$	—
	$0,46 \pm 0,01$		$0,71 \pm 0,005$		$1,37 \pm 0,03$		$0,05 \pm 0,001$	
Зона слабого забруднення	$1,57 \pm 0,09$	12,8	$0,92 \pm 0,01$	2,5	$1,06 \pm 0,03$	6,0	$0,09 \pm 0,004$	10,5
	$4,29 \pm 0,05$	83,2	$1,32 \pm 0,01$	53,8	$5,33 \pm 0,04$	65,0	$0,18 \pm 0,002$	42,5
Зона сильного забруднення	$5,77 \pm 0,09$	56,1	$2,73 \pm 0,06$	19,8	$2,36 \pm 0,07$	21,7	$0,25 \pm 0,01$	33,2
	$10,44 \pm 0,15$	65,1	$4,03 \pm 0,11$	31,2	$11,64 \pm 0,10$	90,6	$0,55 \pm 0,02$	30,8
<i>Populus deltoides</i>								
Умовний контроль	$0,65 \pm 0,15$	—	$0,61 \pm 0,06$	—	$0,72 \pm 0,01$	—	$0,05 \pm 0,004$	—
	$1,79 \pm 0,04$		$1,23 \pm 0,005$		$0,99 \pm 0,09$		$0,07 \pm 0,001$	
Зона слабого забруднення	$1,30 \pm 0,44$	1,4	$0,85 \pm 0,18$	1,3	$0,96 \pm 0,11$	2,2	$0,06 \pm 0,02$	0,5
	$3,21 \pm 0,14$	10,1	$3,39 \pm 0,06$	35,3	$1,54 \pm 0,01$	6,0	$0,11 \pm 0,002$	9,0
Зона сильного забруднення	$4,26 \pm 2,84$	1,3	$3,04 \pm 0,57$	4,3	$1,57 \pm 0,05$	17,1	$0,10 \pm 0,02$	2,1
	$7,81 \pm 0,03$	123,3	$6,93 \pm 0,09$	65,4	$2,38 \pm 0,04$	13,7	$0,23 \pm 0,01$	14,4
<i>Aesculus hippocastanum</i>								
Умовний контроль	$0,18 \pm 0,01$	—	$0,05 \pm 0,005$	—	$0,43 \pm 0,03$	—	$0,04 \pm 0,003$	—
	$0,26 \pm 0,01$		$0,31 \pm 0,01$		$1,14 \pm 0,15$		$0,06 \pm 0,001$	
Зона сильного забруднення	$0,36 \pm 0,02$	6,7	$1,10 \pm 0,09$	11,2	$0,93 \pm 0,02$	17,1	$0,16 \pm 0,02$	5,8
	$1,21 \pm 0,07$	13,8	$2,08 \pm 0,01$	134,9	$2,24 \pm 0,03$	6,8	$0,37 \pm 0,001$	75,6

Примітка. У чисельнику — фаза повного відособлення листка, у знаменнику — 5–10-та доба фази завершення росту листка.

особливо вторинних [10, 11]. Кількість саме сполук тіобарбітурової кислоти (ТБК-активних метаболітів) вважається важливим показником ступеня впливу різних факторів на організм, що дає можливість оцінити функціональний стан рослин та їх неспецифічну адаптаційну здатність [4].

За даними аналізу вмісту продуктів пероксидації в асиміляційних органах контрольних деревних рослин, у всіх досліджених видів у процесі розвитку і формування листкової пластинки відбувалася інтенсифікація пероксидного окиснення ліпідів. Так, якщо у листках *A. hippocastanum* і *P. italica* рівень ТБК-активних сполук зростав неістотно, то у *P. deltoides* — на 45% (табл. 2). Встановлене, найімовірніше, є свідченням видоспецифічності процесів вільнорадикального окиснення ліпідів, які супроводжують метаболізм рослин під час росту та розвитку асиміляційних органів.

Наведені в табл. 2 результати свідчать про те, що підвищений вміст важких металів в органах асиміляції рослин зони сильного забруднення індукує збільшення ТБК-активних продуктів. Проте інтенсивність їх утворення в більшості випадків залежала від рівня акумуляції поллютантів. Так, у *P. italica* концентрація ТБК-активних сполук підвищувалася на 40% у фазу повного відособлення листка та до 52% на 5–10-ту добу фази завершення росту листка порівняно з інтактними рослинами. Необхідно відзначити, що на обох етапах морфогенезу листка у *P. deltoides* в зоні сильного забруднення збільшення вмісту ТБК-активних сполук відбувалося найістотніше з-поміж досліджених видів і у 4,7–6 разів перевищувало даний показник у контролі. Різна активація процесів пероксидного окиснення ліпідів у тополь, найімовірніше, пояснюється видоспецифічністю функціонування антиоксидантних систем, яка була нами встановлена раніше [12].

В умовах забруднення вміст вторинних продуктів пероксидації у *A. hippocastanum* за меншої, на відміну від тополь, акумуляції важких металів протягом всього періоду досліджень зростав у 2,7 раза. Встановлений факт свідчить про те, що навіть незначний вміст токсичних речовин у листках даного виду викликає досить відчутний стресовий відгук.

У відповідь на несприятливі флуктуації абіотичних факторів у рослин відбуваються адаптаційні зміни в органах, які безпосередньо контактують з поллютантами, а саме у листках. Особливе значення в цьому аспекті має кутикула, яка на поверхні листка формує непроникний бар'єр для багатьох розчинних у воді чи повітрі молекул, захищає внутріш-

Таблиця 2. Вміст ТБК-активних продуктів у листках деревних рослин ( $10^{-6}$  М МДА/мг білка)

Моніторингова ділянка	Фаза повного відособлення листка		5–10-та доба фази завершення росту листка	
	$M \pm m$	% до контролю	$M \pm m$	% до контролю
<i>Populus italica</i>				
Умовний контроль	2,64 ± 0,04	—	2,94 ± 0,23	—
Зона слабого забруднення	3,10 ± 0,23	117,3	3,35 ± 0,32	114,1
Зона сильного забруднення	3,68 ± 0,21*	139,2	4,48 ± 0,17*	152,3
<i>Populus deltoides</i>				
Умовний контроль	1,20 ± 0,10	—	1,86 ± 0,12	—
Зона слабого забруднення	4,74 ± 0,21*	393,7	6,64 ± 0,25*	356,6
Зона сильного забруднення	7,33 ± 0,28*	608,7	8,76 ± 0,67*	470,1
<i>Aesculus hippocastanum</i>				
Умовний контроль	2,47 ± 0,05	—	2,51 ± 0,25	—
Зона сильного забруднення	6,27 ± 0,20*	253,8	6,80 ± 0,04*	270,4

\*Різниця статистично вірогідна відносно контролю,  $p < 0,05$ .

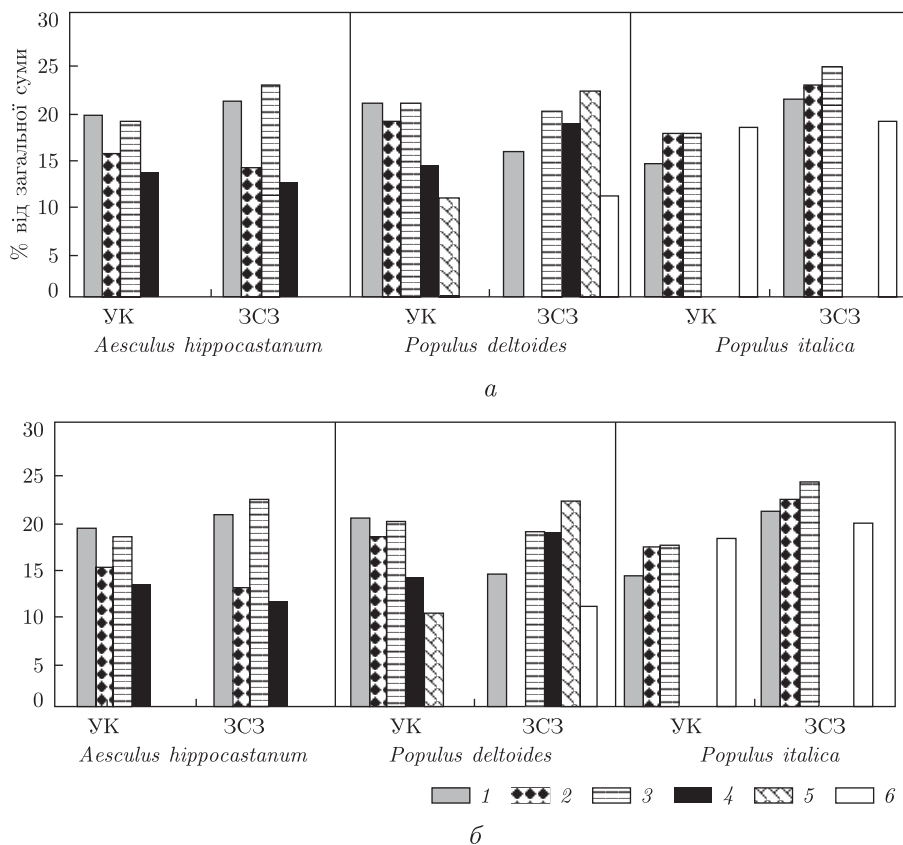


Рис. 1. Кількісний вміст основних фракцій поверхневих ліпідів в асиміляційних органах контрольних деревних рослин у фазу повного відосблення листка (а) та на 5–10-ту добу фази завершення росту листка (б), % від загальної суми (УК — умовний контроль, ЗСЗ — зона сильного забруднення): 1 — фосфоліпіди; 2 — дигліцериди; 3 — етери стеринів; 4 — стерини; 5 — вільні; жирні кислоти; 6 — тригліцериди

нюклітинне середовище рослин від ультрафіолетового опромінення і проникнення патогенних мікроорганізмів [13]. Кутикула складається переважно з восків, насичених оксикислот жирного ряду і суберину. Як правило, вона вкрита шаром суміші ліпідів, яку, на думку деяких дослідників, краще називати поверхневими ліпідами, тому що до неї належать не тільки власне воски, але й етери стеринів, вуглеводні, альдегіди, спирти тощо [14]. В умовах пристосування до факторів зовнішнього середовища відбувається певна трансформація складу поверхневих ліпідів, що може призводити до змін гідрофобності поверхневого шару кутикули [5, 13]. Тому вивчення вмісту і фракційного складу поверхневих ліпідів кутикули листків за дії важких металів дозволить поглибити наші уявлення про механізми адаптації рослин в умовах техногенного забруднення навколишнього середовища.

Згідно з результатами вивчення фракційного складу поверхневих ліпідів (рис. 1), у листках усіх видів контрольних рослин як у фазу повного відосблення листка, так і на 5–10-ту добу фази завершення росту листка найбільше містилося фосфоліпідів, дигліцеридів та етерів стеринів (від 14 до 21% загального вмісту ліпідів). Кількість інших фракцій варіювала від 10 до 14% загального вмісту ліпідів. Також треба зазначити, що фракція вільних жирних кислот була ідентифікована лише в листках *P. deltooides*, а тригліцеридів — у *P. italica*, що, ймовірно, обумовлено видовою специфічністю їх біосинтезу (рис. 2).

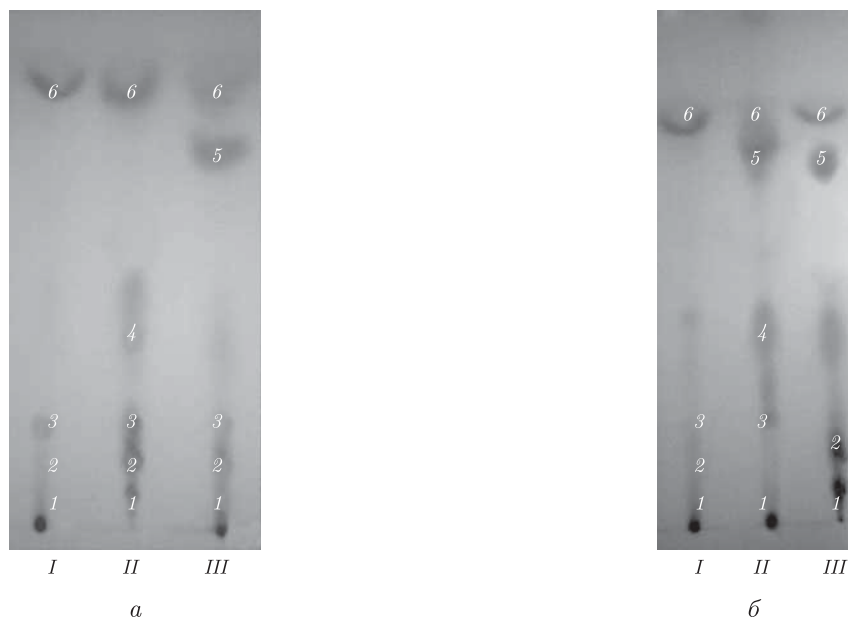


Рис. 2. Тонкошарова хроматограма компонентного складу поверхневих ліпідів у листках у фазу повного відособлення листка: *а* — умовний контроль; *б* — зона сильного забруднення Криворізького сурикового заводу; *I* — *Aesculus hippocastanum*; *II* — *Populus deltooides*; *III* — *Populus italica*; 1 — фосфоліпіди; 2 — дигліцериди; 3 — стерини; 4 — вільні жирні кислоти; 5 — тригліцериди; 6 — етери стеринів

В умовах промислового забруднення в обидві фази морфогенезу листка вміст фосфоліпідів у *P. deltooides* знижувався до 6% відносно контролю, тоді як у *P. italica* і *A. hippocastanum* спостерігалась тенденція щодо його збільшення (див. рис. 1). Вміст дигліцеридів у листках останнього зменшувався порівняно з інтактними рослинами, тоді як у *P. italica* зростав до 5%, а у *P. deltooides* дигліцериди не виявлені (див. рис. 2). Вплив промислового забруднення призводив до зниження вмісту стеринів у *A. hippocastanum* на відміну від *P. deltooides*, в органах асиміляції якого він, навпаки, зростав. У *P. deltooides* зниження вмісту фосфоліпідів супроводжувалось підвищенням у 2 рази кількості вільних жирних кислот (див. рис. 1). Пул вільних жирних кислот може поповнюватися за рахунок гідролізу фосфоліпідів і дигліцеридів, або посилення в клітинах деструктивних процесів і процесів пероксидації в результаті впливу токсикантів. І навпаки, збільшення вмісту фосфоліпідів або дигліцеридів може відбуватись за рахунок зменшення вмісту вільних жирних кислот [15]. Зміна рівня саме фосфоліпідів, дигліцеридів, вільних жирних кислот і стеринів під впливом промислового забруднення може свідчити про стан систем реагування деревних рослин на дію відповідних екологічних чинників.

У процесі пристосування рослин до факторів зовнішнього середовища відбувається біосинтез нових ліпідних компонентів, які впливають на зміну гідрофобності шару кутикули. Наприклад, у складі поверхневих ліпідів у *P. deltooides* ідентифікуються тригліцериди. На нашу думку, утворення тригліцеридів відбувалося за рахунок зменшення кількості дигліцеридів, які розглядаються як субстрати для синтезу більш складних сполук [13]. Характерною особливістю у *A. hippocastanum* і *P. italica* за умов підвищеної акумуляції важких металів було збільшення до 7% в обидві фази морфогенезу листка вмісту ефірів стеринів, що можна розглядати як адаптаційну реакцію рослин до забруднення, адже саме вони обумовлюють в'язкість кутикули [14].



На закінчення зазначимо, що серед досліджених деревних рослин в умовах промислового забруднення в обидві фази морфогенезу листка цинк, плюмбум та кадмій найінтенсивніше накопичуються фотосинтезуючими органами *P. italica*, а нікель — *P. deltoides*, тоді як *A. hippocastanum* найменше акумулював зазначені елементи. Незважаючи на такий характер акумуляції, у *P. italica* встановлено найнижчий рівень процесів пероксидації, на відміну від *P. deltoides*, у якого він найвищий (зростав до 6 разів порівняно з контролем). За дії промислових викидів у *P. italica* виявлено збільшення кількості всіх компонентів поверхневих ліпідів кутикули, серед яких фосфоліпідів, дигліцеридів і етерів стеринів до 5%, тоді як у *A. hippocastanum* відмічено тенденцію щодо зниження вмісту дигліцеридів і стеринів. Лише у *P. deltoides*, на відміну від інших видів, в стресових умовах з'являються тригліцериди і зникають дигліцериди, що свідчить про певні порушення гідрофобності шару кутикули.

*Робота виконана за проектом № 36–11 “Транслокація важких металів і фтору в системі “грунт–рослина” та підвищення стійкості рослин за дії абіотичних факторів” цільової комплексної міждисциплінарної програми наукових досліджень НАН України.*

1. Гладков Е. А. Влияние комплексного взаимодействия тяжелых металлов на растения мегаполисов // Экология. – 2007. – № 1. – С. 71–74.
2. Методические указания по определению тяжелых металлов в почвах сельхозугодий и продукции растениеводства. – Москва, 1989. – 62 с.
3. Камышников В. С. Справочник по клинико-биохимической лабораторной диагностике: В 2 т. – Минск: Беларусь, 2000. – Т. 2. – С. 207.
4. Greenberg Ch. S., Gaddock Rh. R. Rapid single step membrane proteins assay // Clin. Chem. – 1982. – 28, No 7. – P. 1726–1728.
5. Берзенина О. В., Штеменко Н. І., Шепеленко В. М. Методи дослідження поверхневих ліпідів рослин // Вісн. Дніпропетр. ун-ту. Біологія. Екологія. – 2002. – 1, вип. 10. – С. 104–108.
6. Кейтс М. Техника липидологии / Пер. с англ. – Москва: Мир, 1975. – 156 с.
7. Доспехов Б. А. Методика полевого опыта (с основами статистической обработки результатов исследований). – Москва: Агропромиздат, 1985. – 351 с.
8. Ганиятуллин Р. Х. Биоконсервация металлов в надземных органах тополя бальзамического в условиях промышленного загрязнения // Вестн. Мос. гос. ун-та леса. Лес. вестн. – 2007. – № 1. – С. 53–56.
9. Kraemer U., Pickering I. J., Prince R. C. et al. Subcellular localization and speciation of nickel in hyperaccumulator and non-accumulator *Thlaspi* species // Plant Physiol. – 2000. – 122, No 4. – P. 1343–1353.
10. Таран Н. Ю., Оканенко О. А., Бацманова Л. М., Мусієнко М. М. Вторинний оксидний стрес як елемент загальної адаптивної відповіді рослин на дію несприятливих факторів довкілля // Физиология и биохимия культ. растений. – 2004. – Вип. 36, № 1. – С. 3–14.
11. Гришко В. М., Демура Т. А. Інтенсивність акумуляції кадмію і нікелю та рівень їх фітотоксичності за сумісної дії на проростки кукурудзи // Доп. НАН України. – 2008. – № 5. – С. 120–122.
12. Гришко В. Н., Данильчук А. В. Содержание тяжелых металлов и продуктов перекисного окисления липидов у тополей в условиях загрязнения // Интродукция растений. – 2004. – № 2. – С. 54–59.
13. Hoffmann-Benning S., Kende H. Cuticle biosynthesis in rapidly growing internodes of deepwater rice // Plant Physiol. – 1994. – 104, No 2. – P. 719–723.
14. Kunst L., Samuels A. L. Biosynthesis and secretion of plant cuticular wax // Prog. Lipid Res. – 2003. – No 42. – P. 51–80.
15. Духовский П., Юкнис Р., Бразайтите И., Жукаускайте Л. Реакция растений на комплексное воздействие природных и антропогенных стрессоров // Физиология растений. – 2003. – 50, № 2. – С. 165–173.

В. Н. Гришко, О. Н. Писковая

**Процессы пероксидного окисления липидов и изменения количественного и качественного состава поверхностных липидов у *Populus italica* (Du Roi) Moench, *Populus deltoides* Marsh. и *Aesculus hippocastanum* L. при разном уровне загрязнения тяжелыми металлами**

*В условиях промышленного загрязнения соединениями тяжелых металлов в обе фазы морфогенеза листа цинк, свинец и кадмий интенсивнее всего накапливаются фотосинтезирующими органами *Populus italica*, а никель — *Populus deltoides*, тогда как *Aesculus hippocastanum* менее всего аккумулирует отмеченные элементы. Несмотря на указанный характер аккумуляции, у *P. italica* установлен самый низкий уровень процессов пероксидации, в отличие от *P. deltoides*, у которого он наивысший (возрастал до 6 раз в сравнении с контролем). Под действием промышленных выбросов у *P. italica* обнаружено увеличение количества всех компонентов поверхностных липидов кутикулы, максимальное для фосфолипидов, диглицеридов и эфиров стерина — до 5%, тогда как у *A. hippocastanum* отмечена тенденция относительно снижения содержания диглицеридов и стерина. Лишь у *P. deltoides*, в отличие от других видов, в стрессовых условиях появляются триглицериды и исчезают диглицериды, что свидетельствует об определенных нарушениях гидрофобности слоя кутикулы.*

V. M. Gryshko, O. M. Piskova

**Processes of lipids peroxidation and change of the quantitative and qualitative compositions of superficial lipids at *Populus italica* (Du Roi) Moench, *Populus deltoides* Marsh. and *Aesculus hippocastanum* L. at different levels of contaminations by heavy metals**

*Under conditions of the industrial contamination by heavy metals compounds for both phases of leaf morphogenesis, zinc, lead, and cadmium are more intensively accumulated by the *P. italica* photosynthetic organs, and nickel — by *P. deltoides*, while *A. hippocastanum* least accumulates the noted elements. In spite of the indicated character of accumulation, we observed the lowest level of peroxidation processes at *P. italica*, unlike *P. deltoides*, at which it was the greatest (increased by 6 times relative to control). Under the action of industrial contamination, we found out an increase of the amount of all components of superficial lipids of cuticle at *P. italica*, maximal for phospholipids, diglycerides and sterins ethers — to 5%, while we observed the tendency to a decline of diglycerides and sterins at *A. hippocastanum*. Only at *P. deltoides* unlike other species under stress conditions, triglycerides appear, and diglycerides disappear, which testifies to certain violations of the hydrophobicity of cuticles.*

І. М. Ковальова, Л. А. Тараборкін

## Морфоекологічні особливості будови діафрагми кажанів (Chiroptera; Vespertilionidae, Rhinolophidae)

(Представлено членом-кореспондентом НАН України І. А. Акімовим)

Проведено порівняльно-гістохімічне дослідження діафрагми кажанів родин Vespertilionidae та Rhinolophidae. Встановлено статистично достовірну відмінність у будові діафрагми вивчених родин кажанів. Вказані відмінності пов'язані, зокрема, з різним ступенем використання антиортостатичного положення кажанами.

Ефективність респіраторної системи ссавців залежить від ефективної роботи як власне респіраторних, так і респіраторно-моторних органів, до яких, зокрема, відносять діафрагму. Проте, аналіз наукових публікацій показує, що діафрагма кажанів не була до цього часу предметом спеціальних досліджень, хоча її роль у диханні ссавців не викликає сумнівів [1, 2].

Кажани різних родин відрізняються за типом рухливості грудної клітки, а також ступенем диференціації деяких респіраторно-моторних м'язів залежно від тривалості перебування в антиортостатичному положенні (АНОП) [3, 4].

Топографічний і функціональний зв'язок між респіраторно-моторними органами, зокрема грудною кліткою й діафрагмою, передбачає наявність в останній певних морфологічних особливостей. У даній роботі зазначені особливості аналізуються на основі порівняльно-гістохімічного дослідження діафрагми представників підковоносих (Rhinolophidae) та гладконосих (Vespertilionidae) кажанів.

**Матеріал і методи.** Досліджено представників кажанів, грудна клітка яких відповідає низькому та високому ступеню рухливості [5]. Серед перших вивчали представників Rhinolophidae (*Rhinolophus ferrumequinum* — 5 екз., *Rh. hipposideros* — 1 екз.), серед других — представників Vespertilionidae (*Nyctalus noctula* — 3 екз., *Pipistrellus nathusii* — 4 екз.; *Myotis nattereri* — 2 екз.; *Myotis daubentonii* — 2 екз.; *Eptesicus serotinus* — 2 екз.). Кількісну обмеженість матеріалу зумовлено як технічною складністю процесу підготовки зразків, так і червонокнижним статусом кажанів в Україні.

Оцінка фізіологічних характеристик скелетних м'язів хребетних, їхньої метаболічної активності, окиснювальної спеціалізації в гістохімічному аспекті базується на даних щодо їхньої мікроморфології, а саме щодо складу м'язових волокон. Загальноприйнятий підхід у дослідженнях метаболічної активності м'язів полягає в підрахунку кількісних співвідношень волокон різних типів у м'язі. На основі їхнього процентного вмісту роблять висновки про фізіологічні та функціональні властивості м'яза [6–8].

Щоб ідентифікувати типи м'язових волокон гістохімічними методами, оцінювали активність сукцинатдегідрогенази (СДГ) за Нахласом [9] на поперечних зрізах діафрагми кажанів завтовшки 20–40 мкм, виготовлених за допомогою мікротома-кріостата МК-25.

Визначення типів м'язових волокон, вимірювання їхніх діаметрів і підрахунок кількості волокон кожного типу на 1 мм<sup>2</sup> зрізу в декількох (від 5 до 10) випадково вибраних ді-

лянках м'яза виконували під мікроскопом Amplival (Німеччина; ок. 15, об. 40), а також з використанням мікроскопа PGH Rundfunk-Fernschen Niederdorf Stollberg/E Typ S 15 A/G (Німеччина; ок. 7, об. 40). За результатами лінійних вимірювань діаметрів волокон кожного типу обчислювали їхні середні значення та стандартні відхилення. Для вимірювання діаметрів м'язових волокон застосували окуляр-мікрометр МОВ-1–15<sup>x</sup>ГОСТ 7865–56.

**Результати дослідження й обговорення.** За даними аналізу гістопрепаратів поперекових зрізів діафрагмального м'яза досліджуваних представників кажанів встановлено його гетерогенний склад. У діафрагмі підковоносих кажанів виявлено як “білі” волокна *FG*-типу, так і “червоні” волокна *SO*-типу, причому “білі” волокна кількісно переважають (табл. 1). Відношення кількості “червоних” волокон  $N(SO)$  до кількості “білих”  $N(FG)$  на одиницю площі не перевищує одиницю. У діафрагмі гладконосих кажанів також присутні “білі” та “червоні” волокна, проте чисельно переважають “червоні” волокна (див. табл. 1), так що відношення кількості “червоних” волокон до кількості “білих” на одиницю площі перевищує одиницю.

Щоб отримати статистично надійний висновок про відмінність структур діафрагми в *Rhinolophidae* та *Vespertilionidae* за даними про кількісні співвідношення між “червоними” та “білими” волокнами, виконали відповідний статистичний аналіз.

Через відносно невелику кількість розглядуваних даних (для *Rhinolophidae* маємо 6 вимірювань, а для *Vespertilionidae* — 13, див. останню графу в табл. 1) скористались рекомандованим для подібних випадків критерієм Шапіро–Уїлкса (Shapiro–Wilks test) [10], за

Таблиця 1. Середні значення діаметрів (мкм) м'язових волокон діафрагми кажанів з переважно окиснювальним (*SO*) або гліколітичним (*FG*) типом метаболізму

Вид	№ зразка	Характеристика волокон діафрагми						
		“Білі” ( <i>FG</i> ) волокна			“Червоні” ( <i>SO</i> ) волокна			$\frac{N(SO)}{N(FG)}$
		<i>M</i>	<i>m</i>	<i>n</i>	<i>M</i>	<i>m</i>	<i>n</i>	
<i>Rhinolophidae</i>								
<i>Rhinolophus ferrumequinum</i>	1	89,0	10,4	15	63,0	6,3	10	0,67
	2	85,0	11,3	10	69,3	3,5	7	0,70
	3	92,3	6,0	13	63,9	6,5	9	0,69
	4	86,4	9,8	11	62,8	6,7	9	0,82
	5	90,8	8,2	12	62,2	7,5	9	0,75
<i>Rhinolophus hipposideros</i>	6	90,4	8,4	12	61,3	8,3	8	0,67
<i>Vespertilionidae</i>								
<i>Nyctalus noctula</i>	7	96,3	7,4	8	70,5	4,7	11	1,38
	8	101,8	13,4	14	75,6	7,5	17	1,21
	9	104,0	7,4	10	87,5	6,2	12	1,20
<i>Pipistrellus nathusii</i>	10	110,0	10,5	10	86,7	8,2	15	1,50
	11	110,5	11,2	10	88,3	5,4	12	1,20
	12	106,1	16,0	9	88,5	6,3	13	1,44
	13	108,0	14,9	10	82,7	7,5	13	1,30
<i>Myotis nattereri</i>	14	105,4	6,2	12	86,3	8,1	15	1,25
	15	106,5	6,7	10	81,8	7,5	14	1,40
<i>Myotis daubentonii</i>	16	117,9	8,1	12	92,5	7,7	16	1,33
	17	110,4	9,0	13	88,0	6,8	15	1,15
<i>Eptesicus serotinus</i>	18	111,5	13,6	10	83,2	9,7	17	1,70
	19	98,3	8,3	9	82,9	2,6	14	1,56

Примітка. *M* — середнє значення діаметра волокон; *m* — стандартне відхилення; *n* — кількість волокон для підрахунку середнього діаметра.

яким з 90% надійною ймовірністю можна стверджувати, що досліджувані дані походять із сукупності, яка має нормальний розподіл (відповідні  $p$ -значення перевищують 0,1). Отже, побудувавши 95%-й довірчий інтервал для різниці між середніми  $[-0,5308; -0,7467]$ , який, очевидно, не містить значення нуля, а також підрахувавши  $t$ -статистику Стьюдента, яка в цьому випадку дорівнює  $-12,5075$  ( $p$ -значення не перевищує 0,0001), приходимо до висновку, що з надійною ймовірністю 95% середнє значення відношення кількості волокон  $FG$ -типу до кількості волокон  $SO$ -типу в діафрагмі *Rhinolophidae* більше за таке у *Vespertilionidae*.

Представники *Vespertilionidae*, як і більшість інших ссавців, мають реберно-діафрагмальний тип дихання, якому відповідає найбільша диференціація реберної експіраторної й інспіраторної мускулатури [11, 12]. У представників *Rhinolophidae* респіраторні рухи грудної клітки є надто обмеженими; у виконанні вдиху бере участь лише діафрагма та черевні м'язи; встановлено черевний тип вентиляції [12].

Наведені результати дослідження гістохімічної структури діафрагми показують, що в представників *Rhinolophidae* серед м'язових волокон діафрагми переважають волокна  $FG$ -типу з гліколітичним типом обміну, а це, у свою чергу, свідчить про здатність даного органа до функціонування в режимі нетривалої, вибухової роботи, яка призводить до потреби в невідкладному наступному відпочинку тварини. Кількісна перевага м'язових волокон  $SO$ -типу в діафрагмі в представників *Vespertilionidae* з окиснювальним типом метаболізму свідчить про здатність цього м'яза до тривалої роботи без перерви на відпочинок.

Екологічні спостереження й етологічні дані цілком відповідають наведеним у цій роботі результатам. Тривалість фуражування більшості підковоносих кажанів становить не більше 2 год на добу [13]. Відомо також, що підковоноси відрізняються від гладконосних кажанів частими перервами на відпочинок під час полювання [14]. Характерно, що підковоноси кажани під час торпору (так званого денного сну) перебувають завжди в АНОП [15], коли поздовжня вісь тіла в каудо-краніальному напрямку збігається з напрямом вектора сили земного тяжіння. Натомість тривалість фуражування більшості гладконосних кажанів становить від 5 до 7 год на добу; а перебуваючи в торпорі, вони, крім АНОП, використовують різноманітні положення відносно вектора земної гравітації.

Отже, динамічне навантаження на діафрагму в представників *Rhinolophidae* під час фуражування менш тривале, ніж у представників *Vespertilionidae*. Під час торпору кажанів відзначаємо більш тривале статичне (гравітаційне) навантаження на діафрагму в представників *Rhinolophidae* порівняно з представниками *Vespertilionidae*.

Виконане дослідження діафрагми кажанів, які відрізняються як за морфологічними, екологічними, етологічними, так і локомоторними характеристиками, дає можливість зробити такі висновки. М'язові волокна діафрагми представників *Rhinolophidae* переважно  $FG$ -типу, тоді як у діафрагмі представників *Vespertilionidae* — переважно  $SO$ -типу. Характер навантаження на діафрагму в кажанів сильно варіює: динамічне навантаження під час фуражування змінюється статичним навантаженням під час торпору. У представників *Rhinolophidae* діафрагма виявляється більш навантаженою під час торпору порівняно з представниками *Vespertilionidae*, що пояснює переважання в ній волокон  $FG$ -типу з гліколітичним типом обміну; наведені дані й міркування цілком відповідають даним екологічних спостережень про характер чергування під час полювання періодів активного польоту та відпочинку, а також про тривалість перебування в АНОП представників різних видів кажанів.

Отримані результати конкретизують загальне уявлення про наявність раніше виділених груп кажанів з різним ступенем рухливості грудної клітки і, відповідно до цього, —

різним типом дихання. Ця робота заповнює прогалину в аналізі респіраторної системи кажанів. Наведені дані можуть бути використані для аналізу біомеханіки дихання тварин, які перебувають у різних фізіологічних станах.

1. *Campbell E. J. M.* The respiratory muscles and the mechanics of breathing // The respiratory muscles. Mechanics and neural control / Ed. E. J. M. Campbell, E. Agostoni, J. Newsom. – London: Lloyd-Luke, 1970. – Vol. 16. – P. 309–313.
2. *Troyer A., Sampson M., Sigrist S., Macklem P. T.* Action of costal and crural parts of the diaphragm on the rib cage in dog // J. Appl. Physiol. – 1982. – **53**, No 1. – P. 30–39.
3. *Ковалева И. М.* Влияние силы тяготения на адаптацию формы и функции грудной клетки рукокрылых (Chiroptera) // Вісн. Луганського держ. ун-ту ім. Тараса Шевченка. Біол. науки. – 2002. – № 1(45). – С. 115–118.
4. *Ковалева И. М.* Влияние земной гравитации на формирование видовых различий среди рукокрылых // Современные проблемы биологической эволюции: Материалы Междунар. конф. к 100-летию Дарвиновского музея, Москва, 17–20 сентября 2007 г. – Москва: Изд-во ГДМ, 2007. – С. 112–113.
5. *Kovalyova I. M., Taraborkin L. A.* The Empirical estimation of adaptative transformations in the Bats' thorax using the cluster analysis methods // Proceedings of the VIIIth EBRS / Ed. B. Woloszyn. – Krakow: Publication of CIC ISEA PAS, 2001. – Vol. 2. – P. 59–80.
6. *Родионов В. А.* Содержание мышечных волокон разных типов в летательных мышцах рукокрылых (Chiroptera) // Докл. АН СССР. – 1989. – **309**, № 4. – С. 1019–1023.
7. *Armstrong R. B., Ianuzzo C. D., Kunz T. H.* Histochemical and biochemical properties of flight muscle fibers in the little brown bat, *Myotis lucifugus* // J. Comp. Physiol. – 1977. – **119**. – P. 141–154.
8. *Fernandez D. A., Calvo V., Franklin C. E., Johnston I. D.* Muscle fibre types and size distribution in subantarctic notothenoid fishes // J. Fish. Biol. – 2000. – **56**, No 6. – P. 1295–1311.
9. *Волкова О. В., Елецкий Ю. К.* Основы гистологии с гистологической техникой. – Москва: Медицина, 1971. – 272 с.
10. *Компьютерная биометрика* / Под ред. В. Н. Носова. – Москва: Изд-во Моск. ун-та, 1990. – 232 с.
11. *Ковалева И. М.* Морфо-функциональные особенности вентро-торакального комплекса мышц подковоносых и гладконосых летучих мышей (Chiroptera; Rhinolophidae, Vespertilionidae) // Наук. вісн. Нац. аграр. ун-ту. – 1999. – Вип. 16. – С. 77–79.
12. *Ковальова І. М., Кликов В. І., Тараборкін Л. А.* Вивчення зовнішнього дихання кажанів (Chiroptera) методом фізичного моделювання // Наук. вісн. НУБіП України. – 2010. – Вип. 151, ч. 3. – С. 77–84.
13. *Ковальова І. М.* Аналіз добової активності кажанів (Chiroptera) помірних широт // Вісн. Білоцерків. держ. аграр. ун-ту: Зб. наук. праць. – 2007. – Вип. 47. – С. 180–183.
14. *Kunz T. H., Brock C. E.* A comparison of mist nets and ultrasonic detectors for monitoring flight activity of bats // J. Mammal. – 1975. – **56**. – P. 907–911.
15. *Stebbings R. E.* Conservation of European bats. – London: C. Helm, 1988. – 246 p.

Інститут зоології ім. І. І. Шмальгаузена

НАН України, Київ

НТУ України “Київський політехнічний інститут”

Надійшло до редакції 30.01.2012

**И. М. Ковалева, Л. А. Тараборкин**

### **Морфоэкологические особенности строения диафрагмы рукокрылых (Chiroptera; Vespertilionidae, Rhinolophidae)**

*Выполнено сравнительно-гистохимическое изучение диафрагмы рукокрылых семейств Vespertilionidae и Rhinolophidae. Установлено статистически достоверное различие в строении диафрагмы изученных семейств рукокрылых. Указанные отличия связаны, в частности, с различной степенью использования антиортостатического положения рукокрылыми.*

I. M. Kovalyova, L. A. Taraborkin

**The morphoecological features of the structure of bats' (Chiroptera; Vespertilionidae, Rhinolophidae) diaphragm**

*The comparative histochemical investigation of bats' diaphragm in Vespertilionidae and Rhinolophidae families has been fulfilled. Statistically reliable differences in the structure of bats' diaphragm have been established. The indicated differences are connected with the different degrees of using the antiorthostatic position by bats.*

І. В. Харчук, О. А. Столяр, Г. В. Островська, В. К. Рибальченко

## Порівняння стану міокарда під впливом нової цитостатичної сполуки похідного дигідропіролу і 5-фторурацилу

(Представлено членом-кореспондентом НАН України М. Ю. Євтушенком)

*Похідне 1,2-дигідропіролу (Д-1) перевищує вплив 5-фторурацилу на кровонаповнення міокарда, збільшуючи діаметр капілярів. Д-1 частково усуває негативні наслідки впливу оксидативного стресу на серцевий м'яз. Деяка гіпертрофія кардіоміоцитів за умов дії Д-1 на фоні оксидативного стресу свідчить про мобілізацію синтетичного потенціалу клітин серця під впливом даної сполуки, що може бути позитивним в умовах порушення прооксидантно-оксидантної рівноваги при канцерогенезі.*

Більшість існуючих хіміотерапевтичних засобів крім злоякісних клітин, уражують також клітини крові, епітелію ротової порожнини, шлунка і кишечника, а також серце, нирки та інші органи. Саме тому хіміотерапія завжди асоційована з численними побічними ефектами. Важливим завданням сучасної протипухлинної терапії є пошук високоселективних та малотоксичних препаратів [1]. Особливої уваги для вибору оптимальної стратегії лікування заслуговує дослідження кардіотоксичності нових потенційних препаратів з урахуванням тих станів, що супроводжують канцерогенез, зокрема при порушенні прооксидантно-антиоксидантної рівноваги.

Одним із таких нових препаратів є АТФ-конкурентний інгібітор тирозинкіназ похідне дигідропіролу 1,4-заміщений 5-аміно-1,2-дигідропірол-3-он (Д-1), що був синтезований за допомогою *in silico* дизайну Науково-виробничим хіміко-біологічним центром Київського національного університету ім. Тараса Шевченка [2]. Попередні дослідження показали, що Д-1 пригнічує проліферацію декількох ракових ліній клітин, найбільша ефективність була показана на лініях злоякісних клітин K-562 (еритролейкемія), CCRF-CEM (лімфобластна лейкемія), MDA-MB-435 (рак молочної залози), HCT-15 (рак товстої кишки) та SNB-75 (нейробластома). У досліджах *in vivo* для Д-1 встановлена низька токсичність по відношенню до слизової оболонки тонкої та товстої кишок щурів і відсутність пригнічення процесів проліферації [3, 4].

Мета нашого дослідження — вивчення впливу нової цитостатичної сполуки похідного дигідропіролу Д-1 на морфологію міокарда та його порівняння з дією традиційного протипухлинного препарату 5-фторурацилу (5-ФУ), а також визначення впливу Д-1 на міокард за умов оксидативного стресу.

Дослідження проводили на 24 білих щурах-самцях масою 200–250 г. Д-1 у дозі 2,3 мг/кг та 5-ФУ в дозі 45 мг/кг вводили перорально. Оксидативний стрес викликали внутрішньоочеревинним введенням  $\text{CoCl}_2$  у дозі 13 мг/кг [5]. Усі речовини вводили натщесерце щоденно протягом 10 діб. Після стандартної гістологічної обробки зрізи міокарда досліджували за допомогою мікроскопа Olympus BX-41 та програми ImageJ, вимірювали діаметр капілярів для оцінки ступеня кровопостачання міокарда, а також товщину кардіоміоци-



тів (КМЦ) та площу їх ядер з метою виявлення впливу на біосинтетичні процеси. Статистичну обробку проводили з використанням U-тесту Манна–Уїтні за допомогою програми STATISTICA 7.

М'язові волокна міокарда щурів, що отримували новосинтезовану сполуку Д-1, мають приблизно однакову товщину і форму. Цитоплазма клітин забарвлюється рівномірно еозинном у рожевий колір, у ній виявляється поперечна посмугованість. Ядра займають центральне положення і мають овальну форму. Товщина КМЦ та площа їх ядер достовірно не відрізняється від значень контрольної групи (табл. 1). У міокарді щурів, яким вводили препарат порівняння 5-ФУ, спостерігається незначне витончення м'язових волокон, але значення товщини КМЦ достовірно не відрізняється від контролю. Поперечна посмугованість не чітко виражена. Ядра мають овальну форму і займають у клітині центральне положення.

Під впливом обох сполук підвищується кровонаповнення капілярів, що призводить до їх нерівномірного розширення (рис. 1). Під впливом 5-ФУ середнє значення діаметра капілярів збільшується на 9,6%, під впливом Д-1 — на 26,4% порівняно з контрольною групою (див. табл. 1). 5-ФУ викликає подекуди вихід еритроцитів з кровеносного русла. За дії обох сполук характерним є наявність лейкоцитарних інфільтратів у стінці невеликих судин та збільшення кількості лімфоцитів, фібробластів та тучних клітин у міжм'язових проміжках, що може свідчити про збільшення функціонального напруження органа в цілому.

Отже, як 5-ФУ, так і Д-1 викликають зміни у кровонаповненні міокарда, збільшуючи діаметр капілярів, але ефект Д-1 перевищує дію 5-ФУ.

Оскільки для іншого АТФ-конкурентного інгібітора тирозинкіназ похідного малеїміду 1-(4-Cl-бензил)-3-Cl-4-(CF<sub>3</sub>-феніламіно)-1H-пірол-2,5-діону (МІ-1) були встановлені деякі антиоксидантні властивості [6], дослідження впливу Д-1 на серцевий м'яз за умов оксидативного стресу стало наступним етапом роботи. Встановлено, що у тварин з СоCl<sub>2</sub>-індукованим оксидативним стресом м'язовий шар переважно залишається цілісним, м'язові волокна розміщуються пучками, однак більшість з них витончується (табл. 2), а в окремих волокон спостерігаються значні деструктивні зміни. Поперечна посмугованість КМЦ виражена

Таблиця 1. Морфометричні параметри міокарда щурів під впливом Д-1 та 5-ФУ

Експериментальна група	Товщина КМЦ, мкм	Площа ядер КМЦ, мкм <sup>2</sup>	Діаметр капілярів, мкм
Контроль	12,08 ± 1,83	73,28 ± 16,26	5,52 ± 1,21
Д-1	12,01 ± 1,6	72,22 ± 14,13	6,98 ± 2,97*
5-ФУ	11,72 ± 1,66	73,24 ± 16,52	6,05 ± 1,33*

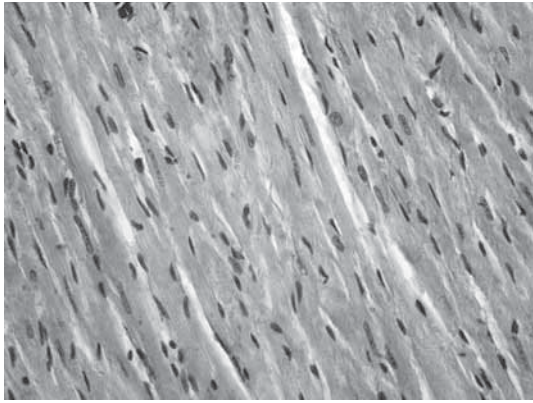
\*Різниця статистично вірогідна порівняно з контролем ( $p \leq 0,05$ ).

Таблиця 2. Морфометричні параметри міокарда щурів під впливом Д-1, СоCl<sub>2</sub>-індукованого оксидативного стресу та їх сумісної дії

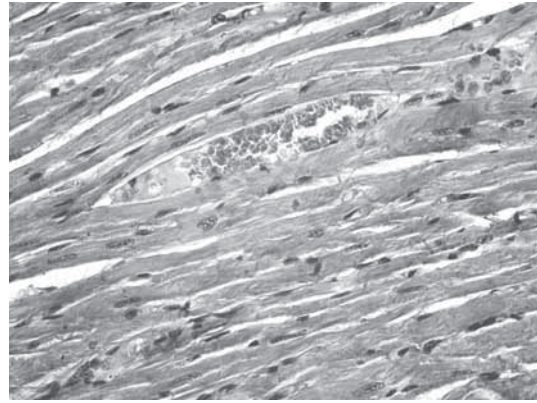
Експериментальна група	Товщина КМЦ, мкм	Площа ядер КМЦ, мкм <sup>2</sup>	Діаметр капілярів, мкм
Контроль	12,08 ± 1,83	73,28 ± 16,26	5,52 ± 1,21
Д-1	12,01 ± 1,6	72,22 ± 14,13	6,98 ± 2,97*
СоCl <sub>2</sub>	11,43 ± 1,53*	68,31 ± 14,07*	7,04 ± 2,23*
СоCl <sub>2</sub> +Д-1	12,72 ± 1,82**	70,98 ± 14,83	7,47 ± 2,74*

\* Різниця статистично вірогідна порівняно з контролем ( $p \leq 0,05$ ).

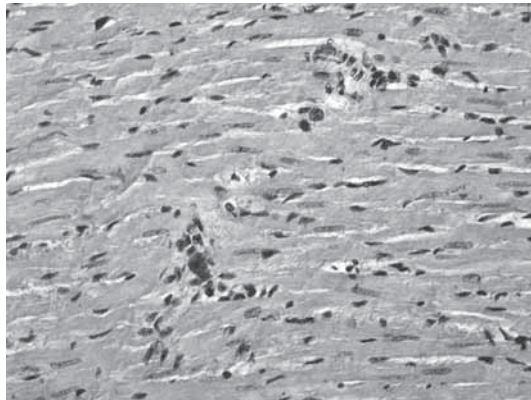
\*\*Різниця статистично вірогідна порівняно з групою СоCl<sub>2</sub> ( $p \leq 0,05$ ).



*a*



*б*



*в*

Рис. 1. Мікрофотографії міокарда щурів контрольної групи (*a*) і груп, що отримували Д-1 (*б*) та 5-ФУ (*в*). Гематоксилін-еозин. Зб. 600

слабко. Форма та розміщення ядер типові, проте їх площа зменшується на 6,8% порівняно з контрольною групою (див. табл. 2). Спостерігається збільшення кровонаповнення капілярів, іноді помітно еритродіapedез. Діаметр капілярів зростає на 27,5%. Відмічається навколосудинний набряк. У стінці судин помітно деструктивні зміни, вона значно інфільтрована лімфоцитами. Про запалення та функціональну напругу органа свідчить також збільшення кількості лімфоцитів, макрофагів, тучних клітин у міжм'язових проміжках.

У групі щурів, що сумісно отримували  $\text{CoCl}_2$  та Д-1, розміщення і форма м'язових волокон не змінюються. Помітна поперечна посмугованість КМЦ. Їх товщина збільшується порівняно як із контролем (на 5,3%), так і з індивідуальним впливом  $\text{CoCl}_2$  (на 11,3%). Площа ядер займає проміжне положення між значеннями груп, що отримували окремо  $\text{CoCl}_2$  та Д-1 і не відрізняється вірогідно від контролю (див. табл. 2). Для сумісної дії сполук характерне нерівномірне кровонаповнення капілярів, що спостерігалось при їх окремій дії. Капіляри розширені та нерівномірно кровонаповнені, їх діаметр зростає на 35,3% порівняно з контролем. Стінки судин великого і середнього діаметра потовщені. Навколо судин невеликого діаметра зберігаються ознаки периваскулярного запалення — спостерігаються інфільтрати, що складаються з лімфоцитів, макрофагів та тучних клітин (рис. 2). Зазначимо, що інший інгібітор тирозинкіназ похідне малеїміду МІ-1 викликає активацію

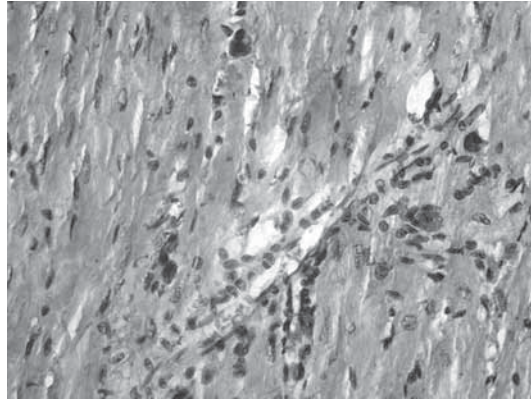


Рис. 2. Ознаки периваскулярного запалення при сумісній дії хлориду кобальту та Д-1. Гематоксилін-еозин. Зб. 600

синтетичних процесів у кардіоміоцитах та подібні зміни в судинному руслі серця за умов тривалого застосування [7].

Таким чином, дія Д-1 на кровонаповнення міокарда щурів перевищує вплив 5-ФУ. Д-1 частково усуває негативні наслідки впливу оксидативного стресу на КМЦ, однак токсична дія новосинтезованої сполуки на капілярне русло виявляється на рівні впливу кобальтіндукованого оксидативного стресу. Деяка гіпертрофія кардіоміоцитів за умов дії Д-1 на фоні оксидативного стресу свідчить про мобілізацію синтетичного потенціалу клітин серця під впливом Д-1, що може бути позитивним в умовах порушення прооксидантно-оксидантної рівноваги при канцерогенезі.

1. *Arias J. L.* Drug targeting strategies in cancer treatment: an overview // *Mini Rev. Med. Chem.* – 2011. – **11**, No 1. – P. 1–17.
2. *Дубініна Г. Г., Воловенко Ю. М.* Сполука 1,4-заміщених 5-аміно-1,2-дигідропірол-3-онів, що має протиракову активність // Патент № 22204 UA від 25.04.2007.
3. *Кузнецова Г. М., Островська Г. В., Рыбальченко В. К.* Порівняння впливу цитостатичних сполук похідного дигідропіролу і 5-фторурацилу на слизову оболонку кишечника щурів // *Соврем. проблемы токсикологии.* – 2011. – № 1–2. – С. 47–51.
4. *Кузнецова Г. М., Островська Г. В., Воловенко Ю. М., Воловченко Т. А., Рыбальченко В. К.* Вплив цитостатичної сполуки похідного дигідропіролу на слизову оболонку тонкого кишечника щурів за умов дії оксидативного стресу // *Проблеми екол. та мед. генетики і клініч. імунології.* – 2010. – Вип. 4 (100). – С. 270–279.
5. *Калиман П. А., Охрименко С. М.* Цикл глюкоза–жирные кислоты при оксидативном стрессе у крыс, вызванном хлоридом кобальта // *Укр. біохім. журн.* – 2005. – **77**, № 2. – С. 154–158.
6. *Яблонська С. В., Філінська О. М., Островська Г. В., Рыбальченко В. К.* Оцінка гепатотоксичності нового похідного малеїміду з цитостатичною активністю і його вплив на перекисне окислення та антиоксидантну систему печінки // *Укр. біохім. журн.* – 2009. – **81**, № 3. – С. 83–92.
7. *Харчук І. В., Рыбальченко В. К.* Реакція міокарда щурів на тривалий вплив похідного малеїміду – потенційного протипухлинного засобу // *Вісн. проблем біології і медицини.* – 2011. – **2**, вип. 2. – С. 282–285.

Київський національний університет  
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 22.12.2011

И. В. Харчук, О. А. Столяр, Г. В. Островская, В. К. Рыбальченко

### Сравнение состояния миокарда под влиянием нового цитостатического соединения производного дигидропиррола и 5-фторурацила

*Производное 1,2-дигидропиррола (Д-1) превышает влияние 5-фторурацила на кровенаполнение миокарда, увеличивая диаметр капилляров. Д-1 частично устраняет негативные последствия влияния оксидативного стресса на сердечную мышцу. Некоторая гипертрофия кардиомиоцитов в условиях действия Д-1 на фоне оксидативного стресса свидетельствует о мобилизации синтетического потенциала клеток сердца под влиянием данного соединения, что может быть положительным моментом в условиях нарушения прооксидантно-оксидантного равновесия при канцерогенезе.*

I. V. Kharchuk, O. A. Stoliar, G. V. Ostrovska, V. K. Rybalchenko

### Comparison of myocardium status under the influence of novel cytostatic compound dihydropyrrole derivate and 5-fluorouracil

*The 1,2-dihydropyrrole (D-1) derivate exceeds the influence of 5-fluorouracil on myocardium blood supply increasing the capillarity diameters. The D-1 derivate partially prevents negative effects of oxidative stress on rat's myocardium. Some hypertrophy of cardiomyocytes under the influence of D-1 in oxidative stress provides the evidence of the synthetic potential mobilization in cardiac cells that may be useful in pro-oxidant-antioxidant disorders under carcinogenesis conditions.*



УДК 577

© 2012

В. В. Гурмач, О. М. Балинський, П. О. Бориско, М. О. Платонов,  
Г. Х. Баєнг, Д. Б. Ковальський, Ю. І. Прилуцький

## Пошук низькомолекулярних лігандів для SH2-доменів методом докінгу міжмолекулярних взаємодій

(Представлено членом-кореспондентом НАН України Д. М. Говорунгом)

*Біологічні процеси в живих системах відбуваються за участі великої кількості різноманітних білкових молекул, які функціонують завдяки взаємодії одна з одною у складі стабільних або динамічних білкових комплексів. Знання просторової структури комплексів клітинних білків та мембранних рецепторів з лігандами є важливим кроком на шляху до розуміння механізмів їх функціонування. У даному повідомленні запропоновано алгоритм дослідження SH2-доменів на прикладі білка STAT3 методом докінгу міжмолекулярних взаємодій, який дозволяє передбачити конформацію ліганду всередині активного центру. Це, зокрема, відкриває шлях до раціонального пошуку і дизайну нових лікарських препаратів, що володіють протипухлинною активністю.*

Взаємодія між білками, нуклеїновими кислотами, вуглеводнями і ліпідами відіграє ключову роль у передачі клітинних сигналів. Крім того, орієнтація взаємодіючих структур впливає як на тип, так і на силу сигналу. Тому знання їх просторової конформації є важливим кроком на шляху до розуміння механізмів функціонування біоб'єктів. Раціональний пошук і дизайн нових лікарських препаратів також потребує структурної інформації щодо їх взаємодії з білком-мішенню. Саме за допомогою комп'ютерного моделювання вдається отримати оптимальні просторові структури ліганду і білка-мішені [1]. Їх детальний аналіз дозволяє визначити основні сили, що сприяють зв'язуванню найбільш комплементарних одна до одної частин молекул.

Як відомо [2], компактний глобулярний SH2-домен взаємодіє з білками, які містять фосфорильований залишок тирозину (Tyr) [2]. Здебільшого цей домен міститься в онкобілках (Src oncoprotein) та у білках, що входять у сигнальні каскади клітини. Людський геном кодує близько 120 SH2-доменів, які відносяться до 110 білків та беруть активну участь у білок-білкових взаємодіях. Їх поширеність в організмі тварин і майже повна відсутність

у мікроорганізмах (наприклад, примітивний SH2-фрагмент у дріжджах) дозволяє зробити припущення, що поява цього домену пов'язана з ускладненням механізмів передачі сигналів у багатоклітинних організмах [3].

Білок STAT3 відноситься до групи молекулярних перемикачів [4]: регулює генну експресію у мітохондріях, впливає на активність електронно-транспортного ланцюга злоякісних пухлин [5]. Тому його інгібування може бути клінічно застосовано у терапії ракових захворювань. Наявні рентгеноструктурні дані свідчать про зв'язування STAT3 з лігандами не пептидної природи. При цьому домінуюча роль належить гетероциклічним структурам як інгібіторам цього білка. Важливо відзначити, що саме не пептидні інгібітори задовольняють вимогам стабільності фармакологічних препаратів в організмі. Гетероциклічні сполуки краще модифікуються для підвищення їх селективності та функціональної активності, зокрема вдається навіть замінити гетероциклічне ядро без втрати активності, що неможливо зробити для пептидоміметиків.

З урахуванням зазначеного вище нами був розроблений і тестований алгоритм пошуку специфічних лігандів для основної платформи SH2-доменів на прикладі SH2-вмісного білка STAT3 для створення цільової бібліотеки на SH2-домени [6–9].

**Методи дослідження.** Пошук лігандів для SH2-домену STAT3 здійснювали методом молекулярного докінгу. Рентгенограми структур STAT3 взято з бази даних PDB. Після їх аналізу були встановлені правила відбору низькомолекулярних лігандів. Для фільтрування комерційно доступної бази хімічних речовин компанії Enamine використовували програму JChem. За допомогою пакета Corina згенеровано всі можливі варіанти стереоізомерів. З використанням програмного пакета flo+ [10] виконано докінг. Отримані результати обробляли multyRmsd фільтрами [11]. Важливо відзначити, що у процесі розрахунків враховано, що діапазон рухливості взаємодіючих структур може бути різним, починаючи з невеликих бічних ланцюгів і закінчуючи масштабними доменними рухами [12].

**Результати та їх обговорення.** Спочатку білок STAT3 дослідили на прикладі простих взаємодій з метою відбору принципово важливих амінокислот для зв'язування лігандів. Для цього було розроблено п'ять моделей, які відрізнялися механізмом зв'язування (рис. 1). Проведені розрахунки виявили, що всі ліганди, які зв'язуються з SH2-доменом, були короткими — їх довжина не перевищувала довжину 2–3-х пептидних зв'язків, а для нормального зв'язування довжина повинна бути із 4–5 пептидних зв'язків. У цьому полягає принципова відмінність взаємодії субстрату і низькомолекулярного ліганду, тобто ліганд повинен на менший об'єм субстрату дати більшу кількість зв'язків. Тому попередньо нами був проведений детальний аналіз поверхні зв'язування білка і на його основі сформульовано унікальні правила зв'язування у кожній з п'яти запропонованих моделей. Наведені на рис. 1 результати для перших чотирьох моделей є наслідком того, що п'ята модель вирізнялася досить широкими енергетичними межами щодо утворення можливих структурних конформацій, завдяки чому в ній відтворювалися всі взаємодії, що характерні для попередніх моделей.

*Перша та четверта моделі* принципово відрізняються за механізмом зв'язування з амінокислотним оточенням, але їм притаманні спільні риси. Так, в обох випадках ліганд щільно заповнює сайт зв'язування фосфотирозину, утворюючи міцні водневі зв'язки: у першому випадку з Lys 591 та Arg 609, а в другому — з Arg 609. Ліганди в обох моделях стерично взаємодіють з багатьма амінокислотами за принципом розпізнавання ароматичного залишку, до яких входять Glu 612, Val 637, Pro 639, Ser 613 й 611.

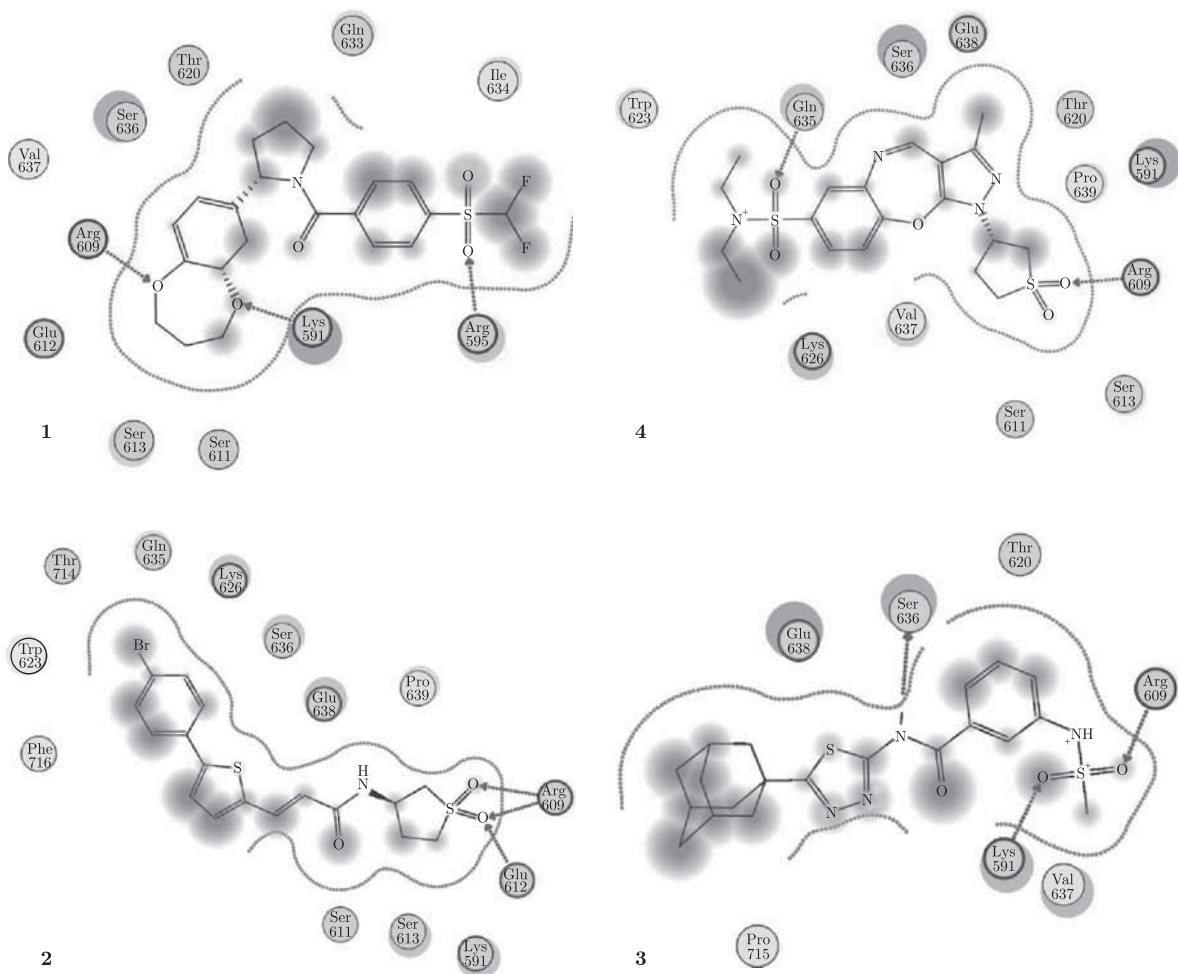


Рис. 1. Розрахункові моделі **1** і **4**, **2** і **3** STAT3 білка (схематичне зображення кишені зв'язування з лігандом)

Перша модель передбачає утворення другого кластеру водневих зв'язків, утворених з Arg 595, який просторово наближений до фосфотирозинового субпакета і має різне функціональне наповнення з точки зору механізму роботи ферменту. Ліганди четвертої моделі заповнюють основний простір кишені при зв'язуванні з 1 або 2 фосфотирозиновим залишком Gln 635 водневим зв'язком. Також, зважаючи на гнучкість лізинового залишку (Lys 626), можливе утворення водневого зв'язку між ним і лігандом. Варто зазначити, що для першої моделі характерні просторово і стерично жорсткі молекули з невеликим об'ємом. На противагу їй у четвертій моделі присутні сполуки з ароматичним каркасом, які можуть бути достатньо гнучкими.

Друга і третя моделі мають однаковий механізм зв'язування з фосфотирозиновим сайтом і демонструють гнучкість у підборі низькомолекулярних структур. Саме цей сайт є ключовим щодо здатності речовин інгібувати мішень. Проте існують інші функціональні групи, які за хімічною будовою та просторовою структурою відрізняються від нього. Так, у другій моделі — це циклосольфановий фрагмент, а також аліфатичний і конформаційно-гнучкий цикл. У третій моделі — це арилсульфамідна група, яка стерично імітує фосфотирозиновий фрагмент. У рамках моделі **2** сполуки заповнюють кишеню, утворену

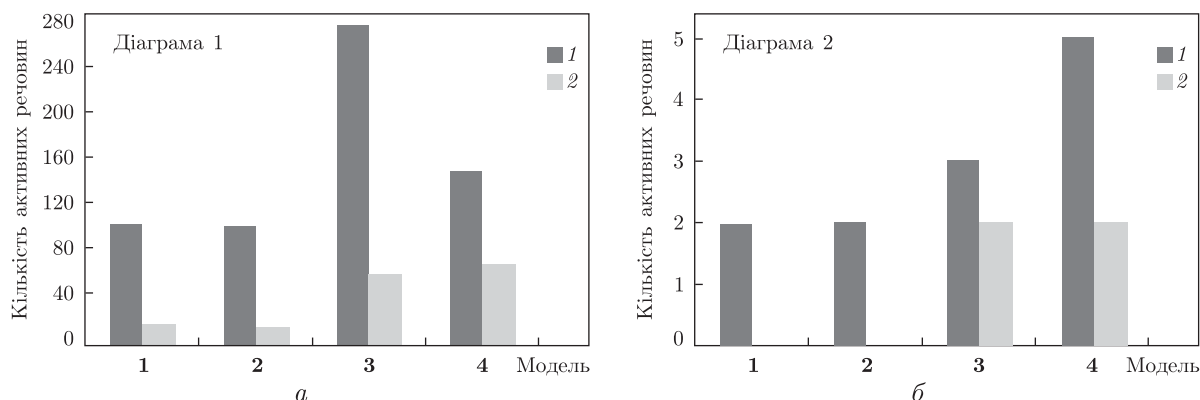


Рис. 2. Порівняння теоретичних даних інгібування (діаграма 1) з експериментальними біологічними даними (діаграма 2) [13].

Умовні позначення: N (1), O (2) — хімічні елементи, за якими відбувалося фільтрування потенційних лігандів у кишені зв'язування

Phe 716, Trp 623, Thr 714 та Lys 626. Ці амінокислотні залишки відносяться до різних структурних фрагментів, але просторово наближені один до одного. Для стабільної взаємодії необхідна конформаційна жорсткість, яка досягається за рахунок спряження складної системи гетероциклів, і домінування в кишені стекінг та катіон- $\pi$ -взаємодій. У третій моделі відбуваються взаємодії, що подібні до зв'язування субстрату. Це єдина схема інгібування, при якій ліганд досягає Pro 715, тобто заповнює об'єм і реалізує контакти з оточенням подібно субстрату. Також важливим є утворення водневого зв'язку з Ser 636, який імітує субстрат.

Проаналізувавши поверхню сайтів зв'язування для перелічених вище моделей, було запропоновано оригінальні правила аналізу для кожної з них. Далі розроблені правила відбору речовин було взято з баз даних Enamine (1,7 млн речовин), які потенційно можуть виступати лігандами SH2-домену STAT3 за такими параметрами (в межах (min/max) значень): розчинність у воді (-6,5-(-3)), величина, що вказує на ліпофільність або гідрофільність речовини (тобто за цим параметром можна судити, як речовина проходить крізь плазматичну мембрану: 1-5,25), акцептори водню (4-12), обертальні зв'язки (3-9) та молекулярна вага (280-480). З використанням розрахункової програми Corina згенерували стереоізмери цих речовин і отримали понад п'ятсот тисяч речовин, які у подальшому використали для молекулярного докінгу.

Як видно з діаграми 1 (рис. 2), після фільтрування залишилося трохи більше тисячі потенційних лігандів SH2-домену. При цьому найбільш активними були ті ліганди, які зв'язувалися з атомами кисню (див. рис. 1). З діаграми 1 випливає, що найбільш вдалою є третя модель, де спостерігається найбільша кількість потенційно активних лігандів. Це може бути пов'язано з тим, що Pro 715 значно виступає над кишенню зв'язування, завдяки чому ліганд практично в усіх випадках змушений зв'язуватися всередині кишені і відповідно закривати її поверхню.

Діаграма 2 (див. рис. 2) демонструє результати біологічного скринінгу понад ста лігандів [13]. Тестування проводили на лінії клітин L540 впродовж 24 год з кожним лігандом за концентрації 30 мкмоль. Теоретичні розрахунки відрізняються від цих даних, оскільки в експерименті найбільш активними виявились ліганди, що отримані в рамках четвертої, а не третьої (як у нашому випадку) моделі. Проте слід зазначити, що всі чотири теоре-



тичні моделі враховують активні сполуки, які значно відрізняються за механізмом зв'язування з амінокислотним оточенням. Тому наразі першочерговим завданням є застосування розробленої методики для цілеспрямованого відбору низькомолекулярних лігандів на всю платформу SH2-доменів. Також перспективним є її використання для роботи з конформаційно-рухливими мішенями, такими, як HIV TAT [14]. У цьому випадку алгоритм розбиття поверхні кишени на принципово різні моделі зв'язування дозволить уникнути втрат лігандів, які взаємодіють за нестандартними механізмами, та отримати важливу інформацію щодо можливості адаптації кишени для зв'язування з лігандом.

1. *Lengauer T., Rarey M.* Computational methods for biomolecular docking // *Curr. Opin. Struct. Biol.* – 1996. – **6**. – P. 402–406.
2. *Гурмач В.В., Балінський О.М., Платонов М.О. та ін.* Метод молекулярного докінгу за участю SH2-доменів як важливих елементів внутрішньоклітинного функціонування // *Біотехнологія.* – 2012. – **5**. – С. 31–40.
3. *Stelzl U., Worm U., Lalowski M. et al.* A human protein-protein interaction network // *Cell.* – 2005. – **122**. – P. 957–968.
4. *Konnikova L., Simeone M. C., Kruger M. M. et al.* Signal transducer and activator of transcription 3 (STAT3) regulates human telomerase reverse transcriptase (hTERT) expression in human cancer and primary cells // *Cancer Res.* – 2005. – **65**. – P. 6516–6520.
5. *Akira S., Nishio Y., Inoue M. et al.* Molecular cloning of APRF, a novel IFN-stimulated gene factor 3 p91-related transcription factor involved in the gp130-mediated signaling pathway // *Cell.* – 1994. – **77**. – P. 63–71.
6. *Bursulaya B. D., Totrov M., Abagyan R., Brooks C. L.* Comparative study of several algorithms for flexible ligand docking // *Comput. Aided Mol. Des.* – 2003. – **17**. – P. 755–763.
7. *Schulz-Gasch T., Stahl M.* Binding site characteristics in structure-based virtual screening: evaluation of current docking tools // *J. Mol. Model.* – 2003. – **9**. – P. 47–57.
8. *Ferrara P., Gohlke H., Price D. J. et al.* Assessing scoring functions for protein-ligand interactions // *J. Med. Chem.* – 2004. – **47**. – P. 3032–3047.
9. *Park I. H., Li C.* Characterization of molecular recognition of STAT3 SH2 domain inhibitors through molecular simulation // *J. Mol. Recognit.* – 2011. – **2**. – P. 54–65.
10. *Gregory L. W., Millard H. L., Simon F. S. et al.* A Critical Assessment of Docking Programs and Scoring Functions // *J. Med. Chem.* – 2006. – **49**. – P. 5912–5931.
11. *Diederichs K.* Structural superposition of proteins with unknown alignment and detection of topological similarity using a six-dimensional search algorithm. *Proteins* // *J. Proteins.* – 1995. – **23**. – P. 95–187.
12. *Betts M. J., Sternberg M. J.* An analysis of conformational changes on protein-protein association: implications for predictive docking // *Protein Eng.* – 1999. – **12**. – P. 271–283.
13. *Kim B. H., Min Y. S., Baeng G. H.* Benzoxathiol derivative BOT – 4-one suppresses L540 lymphoma cell survival and proliferation via inhibition of JAK3/STAT3 signaling // *Exp. Mol. Med.* – 2011. – **43**. – P. 313–321.
14. *Gehlhaar D., Verkhiver G., Reijto P. et al.* Molecular recognition of the inhibitor AG-1343 by HIV-1 protease: conformationally flexible docking by evolutionary programming // *Chem. Biol.* – 1995. – **2**. – P. 317–324.

В. В. Гурмач, О. М. Балинский, П. А. Бориско, М. О. Платонов,  
Г. Х. Баенг, Д. Б. Ковальский, Ю. И. Прилуцкий

### Поиск низкомолекулярных лигандов для SH2-доменов методом докинга межмолекулярных взаимодействий

*Биологические процессы в живых системах происходят с участием большого количества различных белковых молекул, которые функционируют благодаря взаимодействию друг с другом в составе стабильных или динамических белковых комплексов. Знание пространственной структуры комплексов клеточных белков и мембранных рецепторов с лигандами является важным шагом на пути к пониманию механизмов их функционирования. В данном сообщении предложен алгоритм исследования SH2-доменов на примере белка STAT3 методом докинга межмолекулярных взаимодействий, который позволяет предсказать конформацию лиганда внутри активного центра. Это, в частности, открывает путь к рациональному поиску и дизайну новых лекарственных препаратов, обладающих противоопухолевой активностью.*

V. V. Hurmach, A. M. Balynskiy, P. O. Borysko, M. O. Platonov,  
G. H. Baeng, D. B. Kovalsky, Yu. I. Prylutsky

### Search for low-molecular ligands for SH2-domains by the docking method of intermolecular interactions

*Biological processes occurring in living systems involve a large number of different protein molecules that function through the interaction with one another in the composition of stable and dynamic protein complexes. Knowledge of the spatial structure of cellular protein systems and membrane receptors with ligands is an important step toward understanding the mechanisms of their functioning. We propose an algorithm for studying the SH2-domains, for instance, STAT3 protein by the docking method of intermolecular interactions, which allows one to predict the conformation of a ligand within the active site. In particular, it opens a way to the rational search for and the design of new pharmaceutical drugs that have an antitumor activity.*

В. О. Чернишенко, Є. М. Макогоненко,  
член-кореспондент НАН України Е. В. Луговської,  
Т. М. Чернишенко, Т. М. Платонова, Л. І. Михаловська,  
академік НАН України С. В. Комісаренко

## Кінетика гідролізу В $\beta$ -ланцюга молекули фібриногену, мономерного та полімерного фібрину desA фібриногеназою з отрути *Echis multisquamatis*

Досліджено кінетику відщеплення 1–42 пептиду В $\beta$ -ланцюга фібриногену, мономерного й полімерного фібрину desA фібриногеназою з отрути *Echis multisquamatis* з використанням електрофоретичного та денситометричного методів визначення швидкості розщеплення субстрату. Встановлено, що швидкість гідролізу В $\beta$ -ланцюга зменшується в такому ряді: фібриноген, мономерний фібрин, полімерний фібрин desA. Кінетичні параметри реакції становили:  $K_M$  8,0, 9,6, 60 мкмоль/л;  $k_{cat}$  0,13, 0,08, 0,0041 с<sup>-1</sup> відповідно вказаного ряду. Зроблено припущення про те, що зменшення спорідненості ( $K_M$ ) та каталітичної ефективності гідролізу полімерного фібрину desA ферментом залежить від зменшення концентрації доступного субстрату в фібрилах та від залучення В $\beta$ N-домени у взаємодію з D-регіоном у ході формування протофібрил і фібрил.

Раніше було виділено серинову фібриногеназу з отрути *Echis multisquamatis* (ефи багатолускової) та показано її здатність гідролізувати В $\beta$ -ланцюг молекули фібриногену та X-X-R-pNa похідні трипептидів [1]. Мета даного дослідження — порівняння швидкості гідролітичної дії фібриногенази на фібриноген, полімерний і мономерний фібрин desA.

Фібриноген отримували з плазми крові донорів методом, описаним у статті [2]. Мономерний фібрин desA отримували з використанням тромбінподібного ферменту анцистрону, згідно з модифікованою методикою [2]. Фібриногеназу виділяли методом, описаним у статті [1]. Акриламід, ДСН, TEMED були придбані у GE Healthcare (Великобританія), хромогенний субстрат S2302 (H-D-Pro-Phe-Arg-pNa) — у Chromogenix (Швеція), маркери SM0671, що містили поліпептиди з молекулярними масами, кДа: 170, 130, 100, 72, 55, 40, 33, 24, — у Fermentas (Литва), тетрапептид (GPRP) (H-Gly-Pro-Arg-Pro-OH) — у Merck-Biosciences (Німеччина).

Гідроліз фібриногену, взятого в концентрації від 1,4 до 4,0 мкмоль/л, фібриногеназою (0,25 мкмоль/л) проводили в 0,05 моль/л трис-НСІ буфері, рН 7,4, при 25 °С. Пробі відбирали через 2,5, 5, 10 й 15 хв. Реакцію гідролізу зупиняли додаванням буфера для електрофоретичних зразків, що містив 2% ДС-Na, 5% сахарози та 0,2%  $\beta$ -меркаптоетанолу, та прогріванням при 100 °С впродовж 3 хв. Зразки піддавали електрофоретичному розділенню в 12 і 10% ПАГ методом Лемлі. Білкові зони ідентифікували після фарбування Coomassie R-250.

N-кінцевий аналіз В $\beta$ -ланцюга молекули фібриногену після гідролізу фібриногеназою було здійснено на приладі ABI ProCise 494HT Protein Sequencer у відділі біохімії факультету біологічних наук у Кембриджському університеті (University of Cambridge, School of the Biological Sciences, Department of Biochemistry).

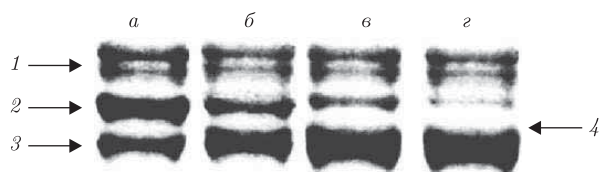


Рис. 1. Електрофореграма препаратів фібриногену (а) та гідролізатів фібриногену фібриногеназою, відібраних через 2,5 хв (б); 5 хв (в), 10 хв (г) інкубації.

Тут і на рис. 2: А $\alpha$ -ланцюг фібриногену (1); В $\beta$ -ланцюг фібриногену (2);  $\gamma$ -ланцюг фібриногену (3); частково гідролізований В $\beta$ -ланцюг фібриногену (4)

Гідроліз фібрину *desA* проходив за тих самих умов, що й гідроліз фібриногену. Реакцію гідролізу ініціювали додаванням до розчину фібриногенази мономерного фібрину *desA*, який одразу полімеризувався у нейтральному середовищі. Реакцію гідролізу зупиняли так само, як описано вище. Проби відбирали через 5, 10, 15 хв. Зразки піддавали електрофоретичному розділенню в ПАГ з ДС- $\text{Na}$ .

Гідроліз мономерного фібрину *desA* фібриногеназою проводили при концентрації фібриногенази 0,18 мкмоль/л у присутності пептиду GPRP, що блокує “а”-центри полімеризації фібрину. Перебіг реакції відбувався в 0,05 моль/л *трис*-HCl буфері, рН 7,4, при 25 °С у діапазоні концентрацій фібрину від 1,7 до 3,7 мкмоль/л та концентрації пептиду GPRP — 1 ммоль/л. Реакцію гідролізу зупиняли через 5, 10, 15 хв так само, як описано вище. Зразки піддавали електрофоретичному розділенню в ПАГ з ДС- $\text{Na}$ .

З урахуванням початкової швидкості реакції гідролізу ( $v_0$ ) для кожної концентрації субстрату визначали  $K_M$  реакції розщеплення фібриногену та фібрину *desA* фібриногеназою та будували криві залежності  $v_0/S_0$ .  $K_M$  встановлювали методом лінеаризації графіка у координатах Лайнуївера–Берка, каталітичну активність  $k_{\text{cat}}$  оцінювали за формулою:  $k_{\text{cat}} = v_{\text{max}}/[E]$ , де  $E$  — концентрація ферменту. Для отримання кінетичних кривих електрофореграми сканували і визначали спад інтенсивності забарвлення зони нативного  $\beta$ -ланцюга фібриногену в часі за допомогою денситометричної програми Totallab TL100. Електрофореграми та відповідні денситограми, що отримано для фібриногену та його гідролізатів при вихідній концентрації субстрату 2,9 мкмоль/л, демонструють рис. 1 й 2. За результатами обчислень денситограм у програмі Totallab TL100 отримано криву гідролізу фібриногену фібриногеназою, за кутом нахилу початкової ділянки даної кривої визначено  $v_0$ .

Дія фібриногенази на фібриноген. Як було встановлено раніше, фібриногеназа при короткочасній інкубації відщеплює від N-кінцевої ділянки В $\beta$ -ланцюга молекули фібриногену пептид молекулярною масою ( $5,1 \pm 0,5$ ) кДа (В $\beta$ N-домен [3]), що дало змогу віднести її до  $\beta$ -фібриногеназ [1]. Проведений N-кінцевий аналіз  $\text{desB}\beta(1-42)_2$ -фібриногену показав, що мішенню гідролітичної дії фібриногенази є пептидний зв'язок В $\beta$ R42-A43, тобто відщеплюваним фрагментом є пептид В $\beta$ 1-42. Оскільки за даних умов А $\alpha$ -ланцюг не зазнавав змін, які могли б бути зареєстровані з використанням електрофоретичного аналізу, нами поставлено за мету визначення й порівняння швидкості відщеплення В $\beta$ N-домену від фібриногену, мономерного і полімерного фібрину *desA*.

Встановлення швидкості реакції гідролізу різних форм фібрин(оген)у проводили впродовж 10 хв. Продукти реакції гідролізу ідентифікували за допомогою електрофорезу в ПАГ у присутності ДСН (див. рис. 1).

За даними денситометричного аналізу відсканованих електрофореграм гідролізатів фібрин(оген)у (див. рис. 2) було обчислено  $v_0$  В $\beta$ -ланцюга фібрин(оген)у для різних вихідних

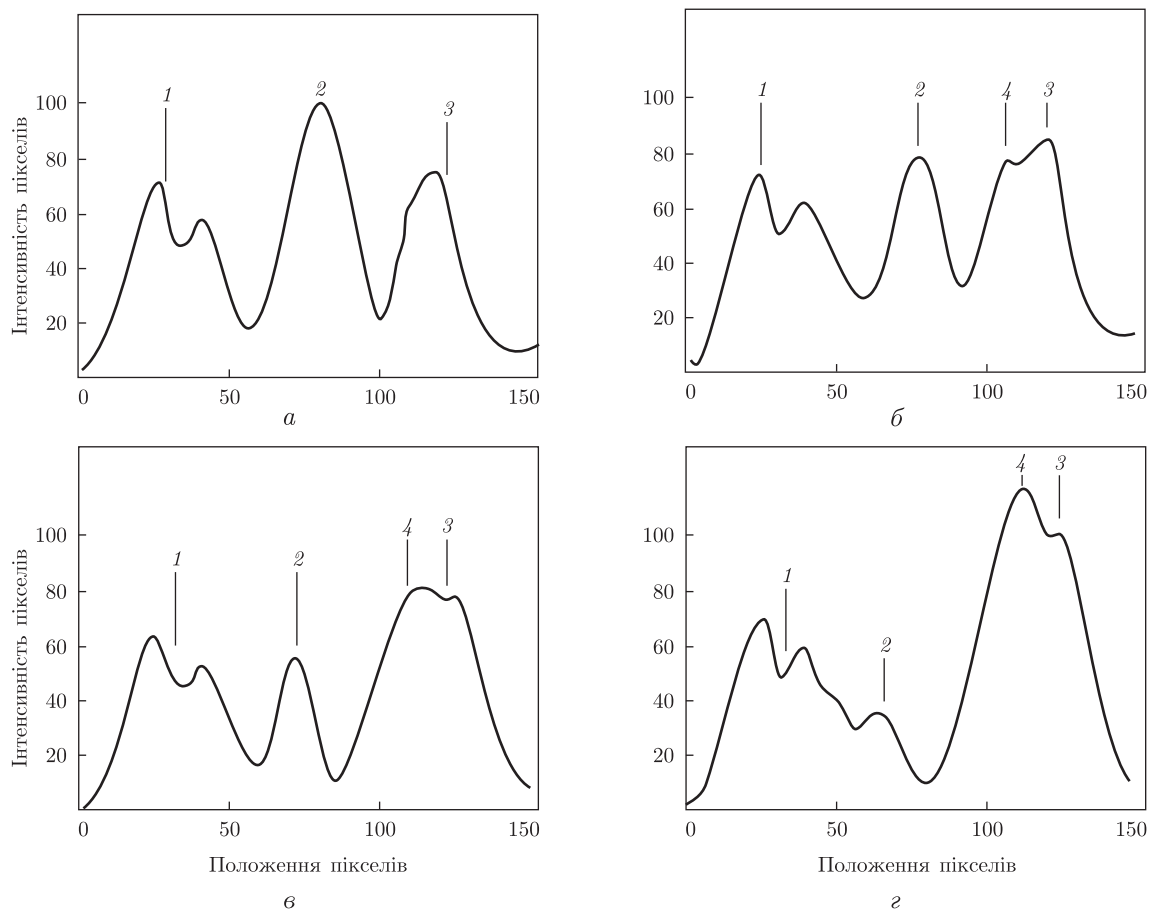


Рис. 2. Денситограми препаратів фібриногену (а) та продуктів гідролізу фібриногену фібриногеназою через 2,5 хв (б); 5 хв (в), 10 хв (г) інкубації, що отримано за результатами обробки у програмі Totallab TL100

концентрацій субстрату та отримано залежності швидкості гідролізу В $\beta$ -ланцюга від концентрації фібриногену, фібрину desA у мономерному і полімерному стані (рис. 3). Слід відзначити, що обчислені кінетичні параметри гідролізу фібриногену, мономерного та полімерного фібрину desA фібриногеназою, які наведено у табл. 1, близькі до відповідних констант реакції відщеплення фібринопептидів А й В від фібриногену тромбіном [4].

*Дія фібриногенази на полімерний фібрин desA.* Для визначення швидкості гідролізу фібрил полімерного фібрину фібриногеназою було проведено полімеризацію фібрину desA у присутності фібриногенази, щоб фермент однорідно розподілився в об'ємі згустку. Порівняно з процесом розщеплення нативного фібриногену гідроліз полімерного фібрину desA

Таблиця 1

Субстрат реакції гідролізу	$K_M$ , мкмоль/л	$k_{cat}$ , с $^{-1}$	$k_{cat}/K_M$ , (мкмоль · с) $^{-1}$
Фібриноген	$8,0 \pm 0,4$	0,130	0,016
Фібрин desA + GPRP	$9,6 \pm 2,1$	0,080	0,0083
Фібрин desA	$60 \pm 1,1$ 10,800*	0,041	0,0007 0,004*

\*Параметри, що обчислені з урахуванням теоретичної концентрації фібрину desA, доступної для гідролізу в фібрилі.

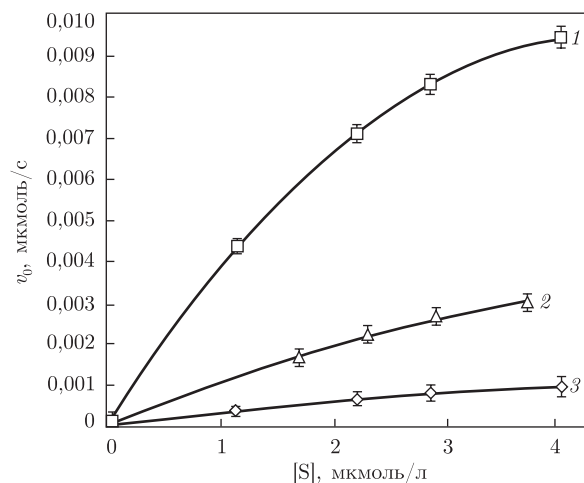


Рис. 3. Залежність початкової швидкості гідролізу фібриногену (1), мономерного (2) та полімерного (3) фібрину desA фібриногеназою від концентрації субстрату

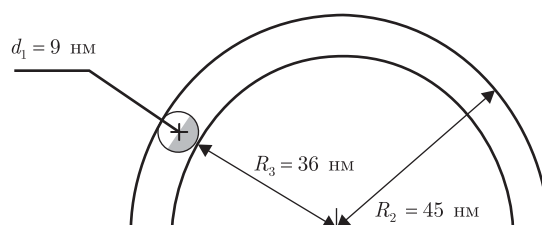


Рис. 4. Схема поперечного перерізу фібрили:  $d_1$  — діаметр протофібрили, яка знаходиться в поверхневому шарі фібрили;  $R_2$  — радіус фібрили;  $R_3 = R_2 - d_1$  — радіус фібрили без урахування поверхневого шару протофібрили

проходив значно повільніше.  $K_M$  збільшувалася майже в 7,5 раза, а  $k_{cat}$  зменшувалася в 3,2 раза, що в цілому зменшувало ефективність гідролізу в 59 разів (див. табл. 1). Оскільки фібриногеназа не зв'язувалася з фібрином і не включалася в структуру фібрили, ми припустили, що зменшення швидкості гідролізу відбувалося завдяки зменшенню кількості доступних для гідролізу фібриногеназою молекул фібрину внаслідок утворення фібрил.

Виходячи з просторових параметрів фібрили (рис. 4), нами розраховано теоретичну концентрацію фібрину desA на поверхні фібрили, яка є доступною для гідролізу ферментом. Відомо [5], що середній діаметр фібрили (85–90 нм) є приблизно однаковим як для фібрину desA, так і для фібрину desAB та істотно не змінюється у діапазоні вихідних концентрацій фібриногену від 1,4 до 4 мкмоль/л, використаних у наших дослідженнях [6]. Вважаючи, що протофібрила має циліндричну форму, приймаємо її діаметр за 9 нм (див. рис. 4). Тоді площа поперечного перерізу фібрили  $S_1$  дорівнює:  $S_1 = \pi R_2^2 = 6,34 \text{ мкм}^2$ . Площа перерізу, яку займають протофібрили, що контактують з розчином, дорівнює:  $S_2 = (\pi R_2^2 - \pi R_3^2) = 6,36 \text{ мкм}^2 - 4,07 \text{ мкм}^2 = 2,29 \text{ мкм}^2$ .

Фібрила утворюється за рахунок латеральної асоціації протофібрил, тому лише 50% молекул фібрину в протофібрилах поверхневого шару звернуті в розчин та є доступними для гідролізу в початковий момент часу. Площа перерізу, яку вони умовно займають, дорівнює:  $S_2/2 = 1,15 \text{ мкм}^2$ . Припускаючи, що щільність молекул фібрину в фібрилі незмінна по всьому перерізу, відсоток доступних для гідролізу в фібрилі молекул фібрину (початкова

концентрація субстрату в реакції гідролізу) становить 18% загальної концентрації фібрину desA.

З урахуванням концентрації доступного для гідролізу фібрину в фібрилі спорідненість фібриногенази до  $V\beta N$ -доменів у фібрилі становитиме  $K_M^* = 10,8$  мкмоль/л, а константа ефективності  $(k_{cat}/K_M)^*$  гідролізу цих доменів у випадку полімерного фібрину desA становитиме  $0,004$  (мкмоль $\cdot$ с) $^{-1}$ .  $K_M$  гідролітичного процесу майже однакова для обох субстратів фібриногенази — фібриногену й полімерного фібрину desA та істотно не залежить від форми і стану фібрин(оген)у. Константа ефективності реакції гідролізу полімерного фібрину desA у чотири рази нижча, ніж у випадку гідролізу фібриногену.

*Дія фібриногенази на мономерний фібрин desA.* Проведені дослідження дозволили припустити, що гальмування швидкості відщеплення  $V\beta N$ -домену полімерного фібрину desA фібриногеназою є концентраційним ефектом і не пов'язане з конформаційними змінами, що супроводжують відщеплення фібринопептиду А. Для перевірки цього припущення було отримано фібрин desA у мономерній формі, додаючи в інкубаційну суміш пептид GPRP.

Як було показано, GPRP не інгібував амідазну активність фібриногенази. Так, активність фібриногенази відносно хромогенного субстрату S2302 у присутності пептиду GPRP становила  $(0,126 \pm 0,06)$  ммоль/(хв $\cdot$ мг), а при його відсутності —  $(0,131 \pm 0,06)$  ммоль/(хв $\cdot$ мг).

Виявилось, що величина  $K_M$  для мономерного фібрину desA (див. табл. 1; рис. 2) майже збігається з  $K_M$  для фібриногену та полімерного фібрину desA. Водночас, константа ефективності реакції гідролізу фібрину desA фібриногеназою вдвічі менша для мономерного фібрину desA та в чотири рази — для полімерного фібрину desA, порівняно з такою для фібриногену. Ці дані вказують на зменшення каталітичної ефективності фібриногенази при перетворенні фібриногену у фібрин та фібриновий гель.

Відомо, що фібриногенази з отрут змій розщеплюють  $A\alpha$ - і/або  $V\beta$ -ланцюги фібриногену. Виділена нами фібриногеназа з отрути *E. multisquamatis* у даних умовах розщеплювала тільки  $V\beta$ -ланцюг фібриногену (див. рис. 1) [1]. Секвенування N-кінцевої послідовності  $V\beta$ -ланцюга в молекулі деградованого фібриногену дозволило встановити, що гідролізу зазнає пептидний зв'язок  $V\beta R42$ -E43 і в реакційне середовище вивільняється пептид  $V\beta 1$ -42. Відщеплення цього фрагмента спричинює практично повну втрату здатності фібриногену до полімеризації [7].

Вважають, що  $V\beta 1$ -42 фрагмент фібриногену утворює домен, який підтримує структуру його молекули [7–9], взаємодіє з  $\alpha C$ -доменами [10] та бере участь у формуванні протофібрил та фібрил [1–13], тобто є надзвичайно важливою ділянкою протеїнової молекули. Порівняння кінетичних параметрів гідролізу фібриногену, мономерного та полімерного фібрину desA фібриногеназою вказує на різну доступність для ферменту пептидного зв'язку  $V\beta R42$ -E43  $V\beta N$ -домену в молекулах фібриногену та фібрину. Було показано, що перетворення фібриногену в фібрин desA та полімеризація останнього майже не зменшує спорідненість ферменту до субстрату, проте зменшує  $k_{cat}$  активного центру і ефективність каталізу  $(k_{cat}/K_M)$  в цілому.

Константа ефективності  $(k_{cat}/K_M)$  та каталітична константа гідролізу фібрину desA, порівняно з такими гідролізу фібриногену (див. табл. 1), зменшується для мономерного фібрину вдвічі, а для полімерного — у чотири рази.

Розрахунок концентрації доступного субстрату в полімерному фібрині desA дозволив припустити, що основною причиною цього явища є просторові перешкоди, які виникають після перетворення фібриногену на полімерний фібрин. Ці перешкоди можуть бути частково пов'язані з конформаційними перебудовами молекули фібрину після відщеплення фіб-

ринопептидів, а саме — з дисоціацією  $\alpha$ C-регіонів від фібринопептидів A та одне відносно іншого [10, 14], а також з участю B $\beta$ N-домену в формуванні протофібрил та їх латеральній асоціації [9, 11].

Таким чином, застосування фібриногенази з отрути *E. multisquamatis* як інструмента аналізу структури субстрату [15] — фібрин(оген)у — вказує на те, що у B $\beta$ N-доміні фібрин(оген)у лише один пептидний зв'язок (B $\beta$ R42-A43) є доступним для гідролізу цим ферментом. Утворення фібрину desA та його полімеризація знижує ефективність дії фібриногенази, завдяки виникненню просторових перешкод у ході послідовних структурних перебудов молекули фібрину desA при формуванні її надмолекулярних комплексів — протофібрил, фібрил і полімерної сітки фібрину.

1. Чернишенко В. О., М'ясникова М. П., Платонова Т. М. та ін. Виділення та характеристика біохімічних властивостей фібриногенази з отрути ефі багатолускової (*Echis multisquamatis*) // Біотехнологія. — 2010. — **3**, № 1. — С. 27–34.
2. Варецька Т. В. Одержання фібрин-мономеру та вивчення його властивостей // Укр. біохім. журн. — 1965. — № 37. — С. 194–206.
3. Medved L., Weisel J. Recommendations for nomenclature on fibrinogen and fibrin // J. Thromb. Haemost. — 2009. — **7**. — Р. 355–359.
4. Higgins D. L., Lewis S. D., Shafer J. A. Steady state kinetic parameters for the thrombin-catalyzed conversion of human fibrinogen to fibrin // J. Biol. Chem. — 1983. — **258**, No 15. — Р. 9276–9282.
5. Weisel J. W. Fibrin assembly. Lateral aggregation and the role of the two pairs of fibrinopeptides // Biophys. J. — 1986. — **50**, No 6. — Р. 1079–1093.
6. Blombäck B., Carlsson K., Hessel B. et al. Native fibrin gel networks observed by 3D microscopy, permeation and turbidity // Biochim. Biophys. Acta. — 1989. — **997**. — Р. 96–110.
7. Pandya B. V., Cierniewski C. S., Budzynski A. Z. Conservation of human fibrinogen conformation after cleavage of the B beta chain NH<sub>2</sub> terminus // J. Biol. Chem. — 1985. — **260**, No 5. — Р. 2994–3000.
8. Siebenlist K. R., DiOrio J. P., Budzynski A. Z., Mosesson M. W. The polymerization and thrombin-binding properties of des - (B beta 1–42)-fibrin // Ibid. — 1990. — **265**, No 30. — Р. 18650–18655.
9. Pandya B. V., Gabriel J. L., O'Brien J. et al. Polymerization site in the  $\beta$  chain of fibrin: mapping of the B $\beta$ 1–55 sequence // Biochemistry. — 1991. — **30**. — Р. 162–168.
10. Litvinov R. I., Yakovlev S., Tsurupa G. et al. Direct evidence for specific interactions of the fibrinogen  $\alpha$  C domains with the central E region and with each other // Ibid. — 2007. — **46**, No 31. — Р. 9133–9142.
11. Lugovskoy E. V., Gritsenko P. G., Kapustianenko L. G. et al. Functional role of B $\beta$ -chain N-terminal fragment in the fibrin polymerization process // FEBS J. — 2007. — **274**. — Р. 4540–4549.
12. Moskowitz K. A., Budzynski A. Z. The (DD)E complex is maintained by a composite fibrin polymerization site // Biochemistry. — 1994. — **33**, No 44. — Р. 12937–12944.
13. Moen J. L., Gorkun O. V., Weisel J. W., Lord S. T. Recombinant B $\beta$ Arg14His fibrinogen implies participation of N-terminus of B $\beta$  chain in desA fibrin polymerization // Blood. — 2003. — **102**, No 7. — Р. 2466–2471.
14. Veklich Y. I., Gorkun O. V., Medved L. V. et al. Carboxy terminal portions of the  $\alpha$ -chains of fibrinogen and fibrin: localization by electron microscopy and the effects of isolated  $\alpha$  C fragments on polymerization // J. Biol. Chem. — 1993. — **268**, No 18. — Р. 13577–13585.
15. Fontana A., Polverino de Lauro P., Spolaore B. et al. Probing protein structure by limited proteolysis // Acta biochim. pol. — 2004. — **51**, No 2. — Р. 299–321.

Інститут біохімії ім. О. В. Палладіна  
НАН України, Київ  
Київський національний університет  
ім. Тараса Шевченка  
Брайтонський університет, Великобританія

Надійшло до редакції 27.01.2012



**В. А. Чернышенко, Е. М. Макогоненко,**  
член-корреспондент НАН Украины **Э. В. Луговской, Т. М. Чернышенко,**  
**Т. Н. Платонова, Л. И. Михаловская,**  
академик НАН Украины **С. В. Комисаренко**

**Кинетика гидролиза В $\beta$ -цепи молекулы фибриногена, мономерного и полимерного фибрина desA фибриногеназой из яда *Echis multisquamatis***

*Исследована кинетика отщепления 1–42 пептида В $\beta$ -цепи фибриногена, мономерного и полимерного фибрина desA фибриногеназой из яда *Echis multisquamatis* с использованием электрофоретического и денситометрического методов определения скорости расщепления субстрата. Установлено, что скорость гидролиза В $\beta$ -цепи уменьшается в следующем ряду: фибриноген, мономерный фибрин, полимерный фибрин desA. Кинетические параметры реакции составляли:  $K_M$  8,0, 9,6, 60 мкмоль/л;  $k_{cat}$  0,13, 0,08, 0,0041 с<sup>-1</sup> соответственно указанного ряда. Сделано предположение, что уменьшение сродства ( $K_M$ ) и каталитической эффективности гидролиза полимерного фибрина desA ферментом связано с уменьшением концентрации доступного субстрата в фибриллах и с вовлечением В $\beta$ N-домена во взаимодействие с D-регионом в ходе формирования протофибрилл и фибрилл.*

**V. O. Chernyshenko, E. M. Makogonenko,**  
Corresponding Member of the NAS of Ukraine **E. V. Lugovskoi,**  
**T. M. Chernyshenko, T. M. Platonova, L. I. Mikhalovska,**  
Academician of the NAS of Ukraine **S. V. Komisarenko**

**Kinetics of fibrinogen, monomeric and polymerized fibrin desA В $\beta$ -chain hydrolysis by *Echis multisquamatis* venom fibrinogenase**

*Kinetics of fibrinogen, monomeric and polymerized fibrin desA 1–42 В $\beta$ -chain peptide cleavage by *Echis multisquamatis* venom fibrinogenase has been studied using electrophoretic and densitometric methods of substrate cleavage rate determination. It is found that the rate of В $\beta$ -chain hydrolysis decreases in the range: fibrinogen, monomeric and polymerized fibrin desA. Kinetic parameters of the reaction are:  $K_M = 8.0, 9.6, 60 \mu\text{mol/l}$ ;  $k_{cat} = 0.13, 0.08, 0.0041 \text{ s}^{-1}$  for fibrinogen, monomeric and polymerized desA fibrin, respectively. It is suggested that decreasing the affinity ( $K_M$ ) and the catalytic efficiency of the enzyme toward the polymeric fibrin desA depends on the decrease of the substrate concentration available in fibrils and on the involvement of В $\beta$ N-domain in the interaction with the D-region during the protofibril and fibril formations.*



УДК 577.332

© 2012

Р. О. Жураківський

## Система внутрішньомолекулярних водневих зв'язків, що стабілізують конформери 2'-дезоксиксантозину

(Представлено членом-кореспондентом НАН України Д. М. Говоруном)

*У повному сімействі конформерів 2'-дезоксиксантозину (dXao) квантово-хімічним аналізом (рівень теорії DFT B3LYP/6-31G(d,p)) топології електронної густини (теорія атомів у молекулах Бейдера) вперше зафіксовано 18 типів внутрішньомолекулярних водневих зв'язків загальною кількістю 167. Наведено їхні конформаційні властивості, геометричні та електронно-топологічні характеристики. Нетипові конформаційні властивості dXao пов'язуються з утворенням зв'язків N3H...O4' та N3H...O5' у суп-конформерах нуклеозиду.*

У попередній роботі [1] проведено повний теоретичний конформаційний аналіз 2'-дезоксиксантозину (dXao) методом MP2/6-311 + +G(d,p)//DFT B3LYP/6-31G(d,p). На поверхні потенціальної енергії нуклеозиду виявлено 103 локальних мінімумів, що відповідають стійким конформерам. Досліджено їхні геометричні, енергетичні та полярні характеристики. Виявлено низку нетипових властивостей dXao, зокрема встановлено, що він має 33 суп-конформери із значеннями кута  $\chi$  ( $-48,0^\circ \leq \chi \leq -10,9^\circ$ ), відсутніми в конформерах інших пуринових 2'-дезоксирибонуклеозидів.

Мета даної роботи — з'ясування специфічних внутрішньомолекулярних взаємодій, насамперед Н-зв'язків, які стабілізують конформери dXao, та виявлення причин нетипової поведінки останнього.

Для цього використано метод, що ґрунтується на аналізі топології електронної густини (так звана теорія атомів у молекулах Бейдера) [2], у поєднанні з квантово-хімічними методами ab initio. Цей метод пропонує фізично обґрунтований пороговий критерій наявності Н-зв'язку АН...В, зокрема внутрішньомолекулярного: наявність критичної точки (3, -1) між атомами Н і В та додатне значення лапласіана електронної густини  $\nabla^2\rho$  в ній.

**Обчислювальні методи.** Використано структурні дані щодо 103 конформерів dXao, наведених у роботі [1]. Аналіз топології електронної густини цих конформерів для хвильових функцій, розрахованих на рівні теорії DFT B3LYP/6-31G(d,p)), проводили з ви-

користанням пакета програм AIMAll [3]. Енергію Н-зв'язків обчислювали за формулою Еспінози–Молінса–Леконта (ЕМЛ) [4]

$$E_{\text{НВ}} = 0,5V(r), \quad (1)$$

де  $V(r)$  — значення локальної потенціальної енергії в критичній точці  $(3, -1)$  зв'язку.

У роботі використано позначення атомів та номенклатурних конформаційних параметрів згідно з [5].

**Результати та їх обговорення.** Отримані дані об'єднано у табл. 1 та 2, їхній аналіз дозволяє зробити такі висновки.

У 103 конформерах dXao наявні 18 типів внутрішньомолекулярних Н-зв'язків загальною кількістю 167 (це більше, ніж в інших досліджених пуринових дезоксирибонуклеозидних [6–8] як за абсолютною кількістю, так і в розрахунку на один конформер). Крім того, визначено п'ять типів ван-дер-ваальсових контактів між атомами С, О та N, а саме (C2'...N3, O4'...N3, O5'...N3, O5'...C4, O5'...N9), які проявляються наявністю критичної точки  $(3, -1)$  та градієнтного шляху. Позитивний знак лапласіана електронної густини свідчить про те, що їх можна віднести до притягувальних взаємодій із закритими електронними оболонками (closed-shell interactions [9]).

Виявлені Н-зв'язки розподіляються на дві групи: ті, що локалізовані в цукровому залишку, та зв'язки між нуклеотидною основою і цукровим залишком. Перші — це зв'язки типів 1, 5, 6 за участю групи O5'Н загальною кількістю 30 (позначення типів Н-зв'язків див. у табл. 2). Других набагато більше — 137. Природно, що Н-зв'язки між основою та цукровим залишком дуже чутливі до їхньої взаємної орієнтації. Так, зв'язки за участю атома N3 (типи 2, 3, 7, 11, 12) реалізуються лише в суп-конформерах, за винятком двох зв'язків C2'Н1...N3, в одному з винятків разом з цим зв'язком співіснує зв'язок C5'Н2...HC8, а в іншому — зв'язок O5'Н...HC8. Зв'язки за участю атома C8 (типи 4, 9, 13–18), навпаки, існують лише в anti-конформерах, винятком тут є зв'язки C2'Н1...HC8, які реалізуються у 10 суп-конформерах, причому для їхнього існування необхідна N-конформація цукрового залишку. Атом O2 основи утворює зв'язки тільки одного типу O5'Н...O2 з групою O5'Н цукрового залишку, яка знаходиться від глікозидного зв'язку (спільної точки кріплення) на найбільшій відстані і здатна дотягнутися до атома O2. Наявність цього зв'язку не залежить від конформації фуранозного кільця і від кута  $\epsilon$ , проте чітко обмежена кутами  $\beta$  та  $\gamma$  — зв'язок існує тільки при  $\beta \in g^+$  та  $\gamma \in t$ . Виключним випадком є зв'язок за участю атома N9 — він існує в єдиному конформері, коли група O5'Н “нависає” над імідазольним кільцем основи.

У конформерах dXao внутрішньомолекулярні Н-зв'язки в більшості випадків співіснують. У 16 суп-конформерах зафіксовано три Н-зв'язки, в 43 конформерах (28 суп та 15 anti) — два Н-зв'язки, в 33 конформерах (17 суп та 16 anti) — один зв'язок. Є також 11 високоенергетичних anti-конформерів, які не охоплені жодним Н-зв'язком.

Значення електронної густини  $\rho$  для внутрішньомолекулярних специфічних взаємодій (див. табл. 1) лежать у межах 0,003–0,036 а.о., а лапласіана електронної густини  $\nabla^2\rho$  — у діапазоні 0,018–0,102 а.о., тобто у межах, постульованих раніше Кохом і Попельє [10].

Дані щодо діапазонів енергій Н-зв'язків також наведено в табл. 1. Як можна припустити, найбільш стабілізуючий вплив на структуру конформерів повинні мати Н-зв'язки N3Н...O5', енергія яких лежить у межах 3,47–8,54 ккал/моль. Так, дійсно перші шість низькоенергетичних конформерів dXao (див. [1]), що лежать у діапазоні відносних вільних енергій 0–2,43 ккал/моль за стандартних умов, мають суп-конформацію і стабілізо-

Таблиця 1. Основні геометричні, електронно-топологічні та енергетичні характеристики внутрішньомолекулярних водневих зв'язків АН...В у конформерах 2'-дезоксиксантозину

Тип	Н-зв'язок АН...В	АВ, Å		НВ, Å		∠АНВ, град		ρ, а. о.		Δ <sup>2</sup> ρ, а. о.		E <sub>НВ</sub> , ккал/моль	
		min	max	min	max	min	max	min	max	min	max	min	max
1	C2'H1...O5'	2,945	3,231	2,427	2,733	105,3	113,2	0,007	0,012	0,029	0,047	1,48	2,73
2	C2'H1...N3	3,318	3,446	2,676	2,805	114,5	117,4	0,006	0,008	0,024	0,031	1,12	1,42
3	C3'H1...N3	3,510	3,521	2,852	2,857	118,4	119,1	0,006	0,006	0,021	0,022	0,96	0,98
4	C5'H1...C8	3,412	3,412	2,919	2,919	107,3	107,3	0,006	0,006	0,020	0,020	0,88	0,88
5	O3'H...O5'	2,930	3,035	2,214	2,351	127,0	129,7	0,013	0,016	0,044	0,051	3,18	4,01
6	O5'H...O3'	2,980	3,065	2,195	2,340	131,0	137,1	0,013	0,016	0,044	0,050	3,15	4,17
7	O5'H...N3	3,251	3,527	2,343	2,600	155,6	160,7	0,007	0,013	0,023	0,035	1,39	2,67
8	O5'H...O2	3,056	3,186	2,232	2,469	130,4	141,7	0,009	0,015	0,033	0,043	2,13	3,57
9	O5'H...C8	3,350	3,350	2,545	2,545	140,7	140,7	0,009	0,009	0,031	0,031	1,56	1,56
10	O5'H...N9	3,243	3,243	2,582	2,582	125,7	125,7	0,008	0,008	0,030	0,030	1,73	1,73
11	N3H...O4'	2,733	3,041	2,098	2,497	111,1	118,7	0,010	0,022	0,040	0,076	2,35	5,62
12	N3H...O5'	2,797	3,108	1,813	2,253	137,1	172,3	0,014	0,036	0,043	0,102	3,47	8,54
13	C8H...O5'	3,291	3,660	2,279	2,705	137,8	156,4	0,006	0,014	0,025	0,041	1,21	3,36
14	C2'H1...HC8	2,825	2,881	2,146	2,163	117,4	121,3	0,009	0,010	0,040	0,041	1,57	1,65
15	C3'H1...HC8	3,072	3,084	2,393	2,417	117,7	118,7	0,005	0,005	0,019	0,020	0,71	0,74
16	C5'H1...HC8	2,861	2,861	2,395	2,395	103,5	103,5	0,006	0,006	0,023	0,023	0,90	0,90
17	C5'H2...HC8	3,148	3,148	2,420	2,420	122,6	122,6	0,005	0,005	0,018	0,018	0,64	0,64
18	O5'H...HC8	3,139	3,442	2,234	2,566	150,8	155,6	0,003	0,006	0,012	0,022	0,39	0,82
19	C2'...N3	—	—	3,231	3,240	—	—	0,007	0,007	0,026	0,027	1,21	1,24
20	O4'...N3	—	—	3,062	3,091	—	—	0,008	0,009	0,035	0,037	1,90	2,05
21	O5'...N3	—	—	3,298	3,298	—	—	0,005	0,005	0,021	0,021	1,14	1,14
22	O5'...C4	—	—	3,284	3,284	—	—	0,005	0,005	0,022	0,022	1,09	1,09
23	O5'...N9	—	—	3,135	3,149	—	—	0,008	0,008	0,026	0,026	1,73	1,77

Примітка. АВ — відстань між донором (А) та акцептором (В) зв'язку; НВ — відстань між атомом водню і акцептором зв'язку; ∠АНВ — кут зв'язування; ρ — електронна густина у критичній точці зв'язку; Δρ — значення лапласіана електронної густини в критичній точці; E<sub>НВ</sub> — енергія зв'язку за формулою (1); min та max — мінімальні на максимальні значення параметрів у межах типу зв'язків відповідно.

Таблиця 2. Конформаційні характеристики внутрішньомолекулярних водневих зв'язків у конформерах 2'-дезоксисантозину

Тип	Н-зв'язок AH...B	Загальна кількість	syn	anti	N	S	$\beta$			$\gamma$			$\varepsilon$		
							$g^+$	$t$	$g^-$	$g^+$	$t$	$g^-$	$g^+$	$t$	$g^-$
1	C2'H1...O5'	18	9	9	0	18	5	9	4	18	0	0	7	4	7
2	C2'H1...N3	5	3	2	2	3	1	3	1	4	0	1	3	1	1
3	C3'H1...N3	2	2	0	2	0	0	0	2	2	0	0	1	1	0
4	C5'H1...C8	1	0	1	0	1	0	1	0	0	1	0	1	0	0
5	O3'H...O5'	6	4	2	6	0	0	3	3	0	0	6	0	0	6
6	O5'H...O3'	6	4	2	6	0	6	0	0	0	0	6	3	3	0
7	O5'H...N3	4	4	0	3	1	3	0	1	3	1	0	2	1	1
8	O5'H...O2	6	6	0	3	3	0	6	0	0	6	0	2	2	2
9	O5'H...C8	1	0	1	0	1	1	0	0	1	0	0	1	0	0
10	O5'H...N9	1	1	0	0	1	1	0	0	1	0	0	1	0	0
11	N3H...O4'	58	58	0	30	28	19	19	20	15	22	21	21	17	20
12	N3H...O5'	20	20	0	11	9	6	12	2	8	12	0	7	7	6
13	C8H...O5'	22	0	22	9	13	6	9	7	15	7	0	8	7	7
14	C2'H1...HC8	10	10	0	10	0	2	2	6	1	3	6	4	2	4
15	C3'H1...HC8	3	0	3	3	0	3	0	0	3	0	0	1	1	1
16	C5'H1...HC8	1	0	1	0	1	0	0	1	0	1	0	1	0	0
17	C5'H2...HC8	1	0	1	1	0	0	0	1	0	0	1	1	0	0
18	O5'H...HC8	2	0	2	1	1	2	0	0	2	0	0	1	0	1
19	C2'...N3	4	0	4	0	4	2	1	1	1	0	3	4	0	0
20	O4'...N3	3	3	0	0	3	0	3	0	3	0	0	1	1	1
21	O5'...N3	1	1	0	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0	1
22	O5'...C4	1	1	0	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0	1
23	O5'...N9	2	1	1	0	2	0	2	0	2	0	0	2	0	0

вані саме зв'язком N3H...O5' з енергією в межах 7,96–8,54 ккал/моль. Відносна вільна енергія першого anti-конформера **7** становить 3,49 ккал/моль. Таким чином, саме стабілізуючим впливом зв'язку N3H...O5' пояснюється аномально високий зсув конформаційної рівноваги syn : anti = 99,98% : 0,02% для dXao. Велика енергія зв'язку N3H...O5' пояснює також розширення діапазону відносних вільних енергій dXao на 1,8–3,4 ккал/моль порівняно з іншими пуриновими дезоксирибонуклеозидами (див. табл. 3 у [1]), мається на увазі, що низькоенергетичні конформери стають ще стабільнішими за рахунок цієї взаємодії.

Іншою нетиповою характеристикою dXao є відсутність конформерів з кутами  $\chi$ , що належать діапазону high-syn ( $60^\circ \leq \chi \leq 120^\circ$ ) і, навпаки, наявність конформерів із кутом  $\chi$  у діапазоні  $-48^\circ \leq \chi \leq -10,9^\circ$ . Таку поведінку можна обґрунтувати наявністю атома водню в третьому положенні основи — це дає змогу утворитися Н-зв'язкам N3H...O5' і особливо N3H...O4', що й зумовлює поворот основи у напрямку до атома O4'. Цю думку підтверджує той факт, що зв'язок N3H...O4' присутній у 58 із 61 syn-конформерів dXao, а в трьох інших присутній контакт N3...O5', який, зважаючи на неістотну різницю в геометричних параметрах між цими конформерами та схожими конформерами із зв'язком N3H...O4', також повинен мати стабілізуючий вплив.

dXao має сім конформерів із незвичними значеннями кута псевдообертання: шість у діапазоні  $49,9^\circ \leq P \leq 70,0^\circ$  і один із значенням  $P = 126,7^\circ$ . У трьох з них є тільки Н-зв'язок N3H...O4', а в інших чотирьох — додатково по одному внутрішньоцукровому Н-зв'язку. Можна припустити, що вплив внутрішньоцукрових взаємодій на конформацію фуранозного кільця неістотний: таким чином, причиною появи незвичних значень кута  $P$  також є наявність іміногрупи N3H та утворення нею Н-зв'язку N3H...O4'.

Серед інших відмінностей dXao є розширення діапазонів  $\beta \in t$  та  $\beta \in g^-$ , звуження діапазону  $\gamma \in g^+$  та розширення діапазону  $\gamma \in t$ , звуження діапазону  $\varepsilon \in t$ , розширення діапазонів кута  $\delta$  (оскільки цей кут за означенням пов'язаний із кутом  $P$ , то причини його такі ж, як і для кута  $P$ ), розширення діапазонів N, S кута  $P$ , звуження діапазону high-anti кута  $\chi$ . Єдиною об'єктивною причиною таких змін теж є іміногрупа N3H.

Таким чином, методом аналізу топології електронної густини вперше отримано дані щодо внутрішньомолекулярних Н-зв'язків у ізольованих конформерах модифікованого дезоксирибонуклеозиду 2'-дезоксисантозину. Вони свідчать про складну систему стабілізації конформерів як класичними, так і нестандартними внутрішньомолекулярними Н-зв'язками, які співіснують з неспецифічними електростатичними взаємодіями між нуклеотидною основою і цукровим залишком. Показано, що модифікація нуклеотидної основи призводить до значної зміни структурних властивостей конформерів dXao.

*Автор висловлює вдячність проф. Д. М. Говоруну за увагу до роботи та надання ліцензійного програмного пакета Gaussian.*

1. Жураківський Р. О. Конформаційна ємність 2'-дезоксисантозину та 2'-дезоксіінозину за даними методу теорії функціонала густини // Доп. НАН України. — 2012. — № 5. — С. 170–179.
2. Бейдер Р. Атоми в молекулах. Квантова теорія. — Москва: Мир, 2001. — 532 с.
3. Keith T. A. AIMAll (Version 10.05.04). — 2010. — Resource access mode: <http://aim.tkgristmill.com>.
4. Espinosa E., Molins E., Lecomte C. Hydrogen bond strengths revealed by topological analyses of experimentally observed electron densities // Chem. Phys. Lett. — 1998. — **285**. — P. 170–173.
5. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. — Москва: Мир, 1987. — 584 с.
6. Жураківський Р. О. Конформаційні властивості елементарних структурних ланок нуклеїнових кислот: неемпіричне квантово-механічне дослідження: Автореф. дис. ... канд. фіз.-мат. наук: спец. 03.00.02 "біофізика". — Київ, 2010. — 20 с.

7. Жураківський Р. О., Говорун Д. М. Конформаційні можливості 2'-дезоксипурину: квантово-механічне дослідження методом функціонала густини // Доп. НАН України. – 2010. – № 1. – С. 180–187.
8. Жураківський Р. О., Говорун Д. М. Конформаційні властивості модифікованого нуклеозиду 2'-дезоксидезокси-8-аза-пурину: квантово-механічне дослідження методом функціонала густини // Там само. – 2010. – № 8. – С. 191–199.
9. Matta C. F., Castillo N., Boyd R. J. Extended weak bonding interactions in DNA: pi-stacking (base-base), base-backbone, and backbone-backbone interactions // J. Phys. Chem. B. – 2006. – **110**. – P. 563–578.
10. Koch U., Popelier P. L. A. Characterization of C–H–O hydrogen bonds on the basis of the charge density // J. Phys. Chem. – 1995. – **99**. – P. 9747–9754.

Інститут молекулярної біології та генетики  
НАН України, Київ  
ННЦ “Державна ключова лабораторія  
молекулярної та клітинної біології”, Київ

Надійшло до редакції 16.12.2011

**Р. А. Жураковский**

### **Система внутримолекулярных водородных связей, стабилизирующих конформеры 2'-дезоксиксантозина**

*В полном семействе конформеров 2'-дезоксиксантозина (dXao) квантово-химическим анализом (уровень теории DFT B3LYP/6-31G(d,p)) топологии электронной плотности (теория атомов в молекулах Бейдера) впервые зафиксировано 18 типов внутримолекулярных водородных связей общим количеством 167. Представлены их конформационные свойства, геометрические и электронно-топологические характеристики. Нетипичные конформационные свойства dXao связываются с образованием связей N3H...O4' и N3H...O5' в syn-конформерах нуклеозидов.*

**R. O. Zhyrakivsky**

### **System of intramolecular hydrogen bonds stabilizing 2'-deoxyxantosine conformers**

*By quantum-chemical analysis of electron density topology (Beider's Atoms-in-Molecule theory) with the DFT B3LYP/6-31G(d,p) theory level, the full conformational set of 2'-deoxyxantosine (dXao) is first shown to have 18 types of intramolecular hydrogen bonds of total 167. Their conformational properties and geometric and electron-topology characteristics are presented. Untypical conformational properties of dXao have been connected with the formation of N3H...O4' and N3H...O5' bonds in syn-conformers.*



УДК 615.272:036.8.796.071:612.08

© 2012

Ю. М. Колесник, член-кореспондент НАН України І. С. Чекман,  
І. Ю. Яковлева, І. Ф. Беленічев, А. В. Абрамов, Н. О. Горчакова

### Порівняльний аналіз впливу таурину і пірацетаму на морфологічні зміни головного мозку щурів при циркуляторній гіпоксії

*Експериментальними дослідженнями на щурах встановлено нейропротекторну дію таурину in vitro, а також in vivo порівняно з пірацетамом щодо морфологічних показників головного мозку щурів при циркуляторній гіпоксії.*

Гостре порушення мозкового кровообігу призводить до розвитку гіпоксії-ішемії мозкової тканини, що супроводжується морфологічними та біохімічними, особливо біоенергетичними та пластичними, порушеннями. При гіпоксії відмічається мітохондріальна недостатність, порушення біохімічних процесів, що визначають структуру і склад нервової тканини, зокрема вміст нуклеїнових кислот, аденілових нуклеотидів, показників тіол-дисульфідної системи, гліколізу та біологічного окиснення [1]. У зв'язку з цим адекватним можна вважати призначення сполук як з антиоксидантною, так і з антигіпоксичною, адаптогенною і актопротекторною дією. Таурин, згідно з сучасними класифікаціями, належить до метаболічних, кардіо-, нейро-, гепатопротекторних лікарських засобів і має вищенаведені властивості [2–5]. Таурин поліпшує енергетичний обмін, АТФ-залежний зв'язок кальцію з сарколемою, за окремими даними виявляє протекторний ефект при гемічній та гістотоксичній гіпоксії [6, 7]. У той же час вірогідна нейропротекторна активність при моделюванні циркуляторної гіпоксії за допомогою гострого порушення мозкового кровообігу (ГПМК) у щурів, зокрема з точки зору морфологічних змін у головному мозку, не встановлена [8]. Циркуляторна гіпоксія, поряд з гемічною, гістотоксичною та гіпоксичною, належить до загальноприйнятих моделей гіпоксії, яка дає можливість визначити не тільки антигіпоксичну, але також нейропротекторну активність, наявність якої допомагає реалізувати актопротекторну дію.

Мета дослідження — встановити нейропротекторну дію таурину щодо морфологічних показників у головному мозку щурів при циркуляторній гіпоксії порівняно з пірацетамом.

**Матеріали і методи дослідження.** Досліди проведені на 80 білих щурах обох статей стадного розведення лінії Вістар масою 180–220 г, які утримувалися на стандартному раціоні



віварію при природній зміні дня і ночі. Щурів поділили на чотири групи по 20 особин у кожній: I — інтактні тварини; II — тварини з ГПМК; III — тварини з ГПМК, яким вводили таурин; IV — тварини з ГПМК, яким вводили пірацетам. Модель циркуляторної гіпоксії відтворювали згідно з [9]. В експериментах на білих щурах викликали двобічну оклюзію загальних сонних артерій, що призводило до ГПМК, при якому спостерігається падіння мозкового кровообігу на 50–60% з поступовим відновленням до 85–90% вихідного рівня через 2–3 доби за рахунок компенсаторного включення колатерального кровообігу [10]. Досліджувані препарати щурам вводили внутрішньоочеревинно: таурин у дозі 100 мг/кг [11], пірацетам у дозі 500 мг/кг [1]. Евтаназію тварин проводили на 4-ту і 18-ту добу під легким ефірним наркозом.

Для визначення нейропротекторної активності таурину *in vitro* проводили виділення забарвлених фракцій нейронів і нейроглії з кори головного мозку в два етапи. На першому етапі мозкову тканину дезінтегрували з метою одержання клітинної суспензії, на другому — здійснювали диференційне ультрацентрифугування в градієнті щільності сахарози та фіколу [12].

Для морфологічних досліджень наркотизованих тварин декапітували, виділяли мозок, 24 год фіксували його у фіксаторі Карнуа [13] і за стандартною схемою заливали в парафінові блоки, з яких готували серійні фронтальні 15-мікронні гістологічні зрізи в ділянці постцентральної звивини (сомато-сенсорна кора). Зрізи депарафінізували та забарвлювали галоціанін-хромовим галуном за Ейнарсеном для специфічного виявлення РНК [13]. Показники визначали за допомогою морфологічних та денситометричних досліджень в ділянці IV–V шарів кори та CA1-зони кори гіпокампа [14]. Морфометричні дані отримували за допомогою мікроскопа Axioskop (Zeiss, Німеччина). Зображення нейронів, які одержували на мікроскопі із застосуванням високочутливої 8-бітної CCD-камери COHU-4922 (COHU Inc., США), вводили в комп'ютерну систему аналізу зображень VIDAS-386 (Kontron Elektronik, Німеччина).

Визначали такі показники: 1) щільність нейронів, гліальних клітин, апоптотичних і деструктивно змінених нейронів (кількість клітин на 1 мм<sup>2</sup> площі зрізу кори мозку); 2) їх процентний склад; 3) площу тіл нейронів, гліальних клітин, апоптотичних і деструктивно змінених нейронів (мкм<sup>2</sup>); 4) вміст РНК у нейронах, гліальних клітинах, апоптотичних і деструктивно змінених нейронах (одиниці оптичної щільності (ООЩ)), який розраховували як логарифм відношення оптичної щільності тіла клітини до оптичної щільності міжклітинної речовини; 5) індекс відношення кількості нейронів, що вижили, до апоптотичних і деструктивно змінених нейронів [14].

Статистичну обробку результатів проводили за допомогою стандартного пакета аналізу програм статистичної обробки результатів версії Microsoft Office Excell 2003. Дані подано у вигляді вибіркового середнього значення  $\pm$  стандартна середня похибка середнього значення. Достовірність відмінностей між експериментальними групами оцінювали за допомогою *t*-критерію Стьюдента та *U*-критерію Вітні–Манна комп'ютерної програми “STATISTICA for Windows 6.0”(StatSoft Inc., №AXXR712D833 214FAN5).

**Результати дослідження та їх обговорення.** Первинна оцінка нейропротекторної, антигіпоксичної дії таурину, проведена в дослідах *in vitro*, показана наявність антигіпоксичної дії при внесенні 500 мкМ препарату в суспензії нейронів (рис. 1). Вважаємо, що таурин не чинить прямої нейропротекторної дії, яка пов'язана з пригніченням глутаматної ексайтотоксичності — головної ланки нейродегенерації, а підвищує виживаність нейронів у дослідах *in vitro* за рахунок високих антиоксидантних властивостей тіольної групи [12].

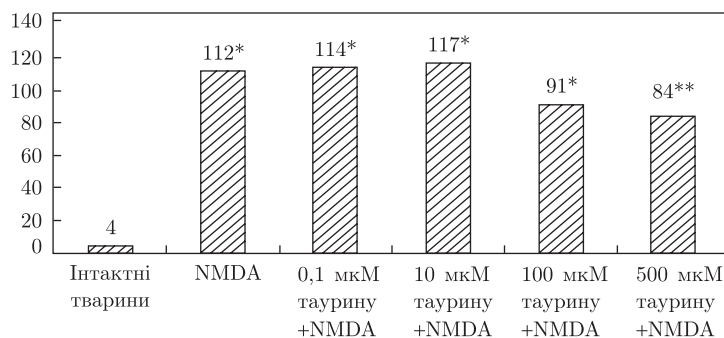


Рис. 1. Вплив таурину на кількість дегенеруючих нейронів у суспензії з додаванням 100 мкМ N-метил-D-аспартату (NMDA),  $n = 15$ .

\* $P < 0,05$  порівняно з інтактними тваринами.

\*\* $P \leq 0,05$  порівняно з контролем

Моделювання ГПМК у щурів призводило до вірогідного зменшення щільності нейронів у корі на 17% порівняно з інтактними тваринами (табл. 1). При цьому відмічалось вірогідне зменшення площі тіл нейронів на 16,04% зі зниженням у них вмісту РНК в 1,8 раза порівняно з інтактними тваринами. Крім того, спостерігалась тенденція до зменшення щільності гліальних клітин у корі головного мозку та вірогідне збільшення площі гліоцитів на 8,3 та 5,3% на 4-ту і 18-ту добу відповідно, що супроводжувалося зниженням вмісту РНК у цих клітинах у 3,18 та 3,21 раза на 4-ту та 18-ту добу відповідно (табл. 2). Це свідчить про пригнічення функціонального стану гліоцитів у відповідь на ішемічне пошкодження мозку.

Таблиця 1. Порівняльна оцінка впливу таурину (100 мг/кг) і пірацетаму (500 мг/кг) на щільність нейронів (кількість клітин/мм<sup>2</sup> площі зрізу) IV–V шарів кори головного мозку щурів з експериментальною ішемією,  $n = 20$

Умови експерименту	Щільність нейронів, клітин/мм <sup>2</sup>		Площа тіл нейронів, мм <sup>2</sup>		Вміст РНК в нейронах, ООЩ	
	4-та доба	18-та доба	4-та доба	18-та доба	4-та доба	18-та доба
Інтактні тварини	1281 ± 34	1292 ± 31	75,21 ± 1,12	74,87 ± 1,32	9,69 ± 0,15	9,72 ± 0,14
ГПМК	1065 ± 27*	1082 ± 19*	63,15 ± 0,9*	63,12 ± 0,8*	5,4 ± 0,2*	5,5 ± 0,6*
ГПМК + таурин	1067 ± 33*	1177 ± 17**	64,11 ± 0,5*	70,11 ± 0,7**	5,6 ± 0,11*	8,11 ± 0,17**
ГПМК + пірацетам	1060 ± 38*	1163 ± 26**	63,46 ± 0,8*	68,71 ± 0,9**	5,7 ± 0,18*	8,03 ± 0,23**

\* $P < 0,05$  порівняно з інтактними тваринами.

\*\* $P < 0,05$  порівняно з контролем ГПМК.

Таблиця 2. Порівняльна оцінка впливу таурину (100 мг/кг) і пірацетаму (500 мг/кг) на щільність нейроглії (кількість клітин/мм<sup>2</sup> площі зрізу) IV–V шарів кори головного мозку щурів з експериментальною ішемією,  $n = 20$

Умови експерименту	Щільність гліальних клітин, клітин/мм <sup>2</sup>		Площа тіл гліальних клітин, мм <sup>2</sup>		Вміст РНК в гліальних клітинах, ООЩ	
	4-та доба	18-та доба	4-та доба	18-та доба	4-та доба	18-та доба
Інтактні тварини	418 ± 21	421 ± 14	20,5 ± 0,19	20,7 ± 0,24	3,34 ± 0,07	3,31 ± 0,05
ГПМК	396 ± 11	410 ± 11	22,2 ± 0,11*	21,8 ± 0,17*	1,05 ± 0,02*	1,03 ± 0,02*
ГПМК + таурин	408 ± 11	433 ± 10	21,8 ± 0,12	22,0 ± 0,11	1,25 ± 0,04**	2,00 ± 0,02**
ГПМК + пірацетам	400 ± 19	435 ± 14	21,7 ± 0,28	22,3 ± 0,18	1,25 ± 0,02**	1,89 ± 0,03**

\* $P < 0,05$  порівняно з інтактними тваринами.

\*\* $P < 0,05$  порівняно з контролем ГПМК.

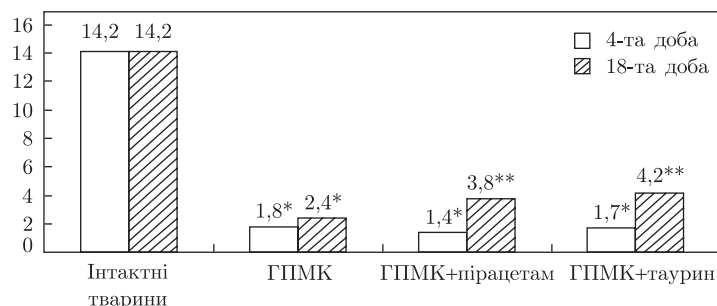


Рис. 2. Порівняльна оцінка впливу таурину (100 мг/кг) і пірацетаму (500 мг/кг) на відношення нейронів, що вижили, до числа загиблих у корі головного мозку щурів (поля IV–V) з експериментальною ішемією,  $n = 20$ .

\*  $P < 0,05$  порівняно з інтактними тваринами.

\*\*  $P \leq 0,05$  порівняно з контролем

У корі головного мозку щурів при моделюванні ГПМК вірогідно підвищувалася щільність апоптичних клітин у 17 разів, а також зростала частка апоптичних і деструктивно змінених клітин у 10 разів і 8,7 раза на 4-ту і 18-ту добу відповідно (табл. 3). Також моделювання ГПМК призводило до зниження відношення кількості нейронів, що вижили, до числа загиблих у 7,8 та 5,9 раза на 4-ту і 18-ту добу відповідно (рис. 2).

Експериментальна терапія тварин з ГПМК таурином і пірацетамом не впливала на щільність нейронів і гліоцитів у корі головного мозку в гострий період ішемії (на 4-ту добу). У віддалені терміни ішемії (на 18-ту добу), порівняно з групою щурів з ГПМК, таурин і пірацетам спричиняли вірогідне підвищення щільності нейронів на 8,8 і 7,5%, площі тіл нейронів на 11 і 8,8%, зростання вмісту РНК в нейронах у 1,47 і 1,46 раза відповідно (див. табл. 1), а також тенденцію до підвищення щільності гліальних клітин та площі тіл гліальних клітин у корі головного мозку щурів (див. табл. 2). За дії таурину і пірацетаму підвищувався вміст РНК у гліальних кітинах на 4-ту добу ГПМК на 19% та на 18-ту добу ГПМК в 1,9 та 1,83 раза відповідно (див. табл. 2). Обидва препарати виявляли протекторну дію щодо гліальних клітин, підвищували їх виживаність з 4-ї доби експерименту, з максимальним проявом ефекту у відновлювальний період церебральної ішемії. Отримані результати не суперечать даним інших дослідників, які встановили, що таурин є нейротрофічним засобом, регулює нейропередачу, активує гліоцитоз, сприяє активному метаболізму нейротрансмітерів [5].

Таблиця 3. Порівняльна оцінка впливу таурину (100 мг/кг) і пірацетаму (500 мг/кг) на щільність апоптичних і деструктивно змінених клітин IV–V шарів кори головного мозку щурів з експериментальною ішемією,  $n = 20$

Умови експерименту	Щільність апоптичних клітин на 1 мм <sup>2</sup>		Частка апоптичних і деструктивно змінених клітин, %	
	4-та доба	18-та доба	4-та доба	18-та доба
Інтактні тварини	23 ± 7	23 ± 1	2,8 ± 0,4	2,8 ± 0,4
ГПМК	394 ± 18*	387 ± 18*	28,45 ± 0,8*	24,36 ± 0,7*
ГПМК + таурин	371 ± 9*	268 ± 11**	21,7 ± 0,7**	17,8 ± 0,3**
ГПМК + пірацетам	418 ± 21*	293 ± 18**	26,3 ± 1,7*	19,4 ± 0,5**

\*  $P < 0,05$  порівняно з інтактними тваринами.

\*\*  $P < 0,05$  порівняно з контролем ГПМК.

Таурин спричиняв зниження кількості деструктивно та апоптично змінених нейронів у корі мозку щурів на 18-ту добу ГПМК на 31%, не впливаючи на цей показник у гострий період патології (на 4-ту добу) (див. табл. 3). Кількість апоптичних і деструктивно змінених нейронів при введенні пірацетаму тваринам з ГПМК була вищою, ніж у групі контрольних тварин у гострий період ішемії (4-та доба), а у віддалений термін (18-та доба) препарат також вірогідно знижував відсоток апоптичних нейронів на 24,3%. Тобто таурин і пірацетам у гострий період мозкового інсульту (4-та доба) не мають нейропротекторної дії, тому що впливають виключно на анаеробне окиснення, здатні посилювати явища лактат-ацидозу і тим самим погіршують загальну картину ішемії мозку, яка підтверджується результатами біохімічних експериментальних і клінічних досліджень. Таурин вірогідно зменшував частку апоптичних і деструктивно змінених нейронів у головному мозку щурів з ГПМК на 23,7% у гострий період ішемії (4-та доба) і на 26,9% у відновний період (18-та доба). У відновний період (18-та доба) таурин і пірацетам вірогідно підвищували відношення кількості нейронів, що вижили, до числа загиблих у корі головного мозку щурів в 1,75 та 1,6 рази відповідно, що сприяло збільшенню загальної щільності клітин порівняно з контрольними значеннями і зниженню відсотка апоптичних нейронів (див. рис. 2).

Як у дослідженнях *in vitro*, так і *in vivo* встановлено, що таурин має певну нейропротекторну та цитопротекторну активність. Аналізуючи дані літератури та результати проведених досліджень, можна припустити, що таурин знижує нейродегенерацію за умов ініціювання глутаматної ексайтотоксичності за рахунок зв'язку цитотоксичних дериватів NO, гіперпродукція яких обумовлена активацією NMDA-рецепторів, відкриттям кальцієвих каналів і наступною активацією нейрональної NO-синтази [12].

На підставі результатів досліджень можна зробити висновок, що таурин і пірацетам мають нейропротекторну активність, більш виражену у відновний період ГПМК (на 18-ту добу). Нейропротекторна активність таурину стосовно відновлення (нормалізації) морфологічних показників у корі головного мозку щурів з ГПМК вища, ніж у пірацетаму, що може свідчити про більшу ефективність таурину при циркуляторній гіпоксії.

Таким чином, проведені дослідження показали, що у щурів з ГПМК у мозковій тканині на 18-ту добу експерименту знижується щільність нейронів, площа тіл нейронів, вміст РНК у нейронах і гліюцитах та відношення кількості нейронів, що вижили, до числа загиблих, підвищується щільність апоптичних клітин, а також частка апоптичних та деструктивно змінених клітин. У тварин, яким вводили таурин у дозі 100 мг/кг, на 18-ту добу відновлюється щільність, площа тіл нейронів, вміст РНК у нейронах і гліюцитах, підвищується відношення кількості нейронів, що вижили, до числа загиблих, а також зменшується щільність апоптичних клітин, частка апоптичних і деструктивно змінених клітин у корі головного мозку щурів. Таурин у дослідях *in vitro* при моделюванні ексайтотоксичності за допомогою 100 мкМ NMDA на суспензії нейронів головного мозку щурів має нейропротекторну дію при внесенні в середовище в концентрації 500 мкМ.

1. Беленичев И. Ф., Черный В. И., Колесник Ю. М. и др. Рациональная нейропротекция. – Донецк: ИД “Заславский”, 2009. – 262 с.
2. Вислобоков А. И., Игнатов Ю. Д., Галенко-Ярошевский П. А., Шабанов П. Д. Мембранотропное действие фармакологических средств. – Краснодар: Просвещение Юг, 2010. – 528 с.
3. Громова О. А., Торшин И. Ю., Гусев Е. И. и др. Молекулярные механизмы воздействия аминокислот в составе церебролизина на нейротрансмиссию. Нейротрофические и нейропротективные эффекты аминокислот // Трудный пациент. – 2010. – № 2. – С. 25–31.
4. Чекман И. С., Горчакова Н. А., Французова С. Б., Нагорная Е. А. Метаболитные и метаболитотропные препараты в системе кардио- и органопротекции. – Киев, 2009. – 155 с.

5. *Wu J., Kohno T., Georgiev S. K. et al.* Taurine activates glycine and gamma-aminobutyric acid A receptors in rat substantia nigra neurons // *Neuroreport*. – 2008. – **19**, No 3. – P. 333–337.
6. *Маньковська І. М., Назаренко А. І., Носар В. І. та ін.* Нові шляхи патогенетичної корекції гемічної гіпоксії // *Физиол. журн.* – 1992. – **38**, № 2. – С. 43–47.
7. *Бабак В. В.* Фармакодинамика сочетанного применения сердечных гликозидов с цистеином, ацетил-цистеином, таурином: Автореф. дис. ... канд. мед. наук. – Киев, 1990. – 22 с.
8. *Кутняк В. П., Горчакова Н. О., Кава Т. В. та ін.* Вивчення ефективності мембранопротекторних засобів в умовах ішемічного та реперфузійного пошкодження мозку // *Наук. вісн. нац. мед. ун-ту ім. О. О. Богомольця*. – 2008. – № 1. – С. 35–39.
9. *Чекман И. С., Губский Ю. И., Беленичев И. Ф. и др.* Доклиническое изучение специфической активности потенциальных нейропротективных препаратов: Метод. рекомендации. – Киев, 2010. – 80 с.
10. *Tyson G. W., Teasdale G. M., Graham D. I., McCulloch J.* Focal cerebral ischemia in the rat: topography of hemodynamic and histopathological changes // *Ann. Neurol.* – 1984. – **15**. – P. 559–567.
11. *Звягинцева Т. В., Киричек Л. Т., Кратенко А. С. и др.* Таурин: стресс-протекторное действие в эксперименте // *Эксперим. і клін. медицина*. – 2006. – № 3. – С. 33–36.
12. *Яковлева І. Ю., Беленічев І. Ф.* Мітопротекторний механізм нейропротекторної дії яктону в умовах експериментальної церебральної ішемії // *Вісн. проблем біології і медицини*. – 2010. – Вип. 2. – С. 147–150.
13. *Пирс Э.* Гистохимия. – Москва: Изд-во иностр. лит-ры, 1962. – 962 с.
14. *Kolesnik Y. M., Abramov A. V.* Image analysis system for quantitative immunofluorescence measurement // *Microscopy and Analysis*. – 2002. – No 5. – P. 12–16.

*Національний медичний університет*

*ім. О. О. Богомольця, Київ*

*Запорізький державний медичний університет*

*Надійшло до редакції 07.02.2012*

**Ю. М. Колесник**, член-корреспондент НАН України **И. С. Чекман**,  
**И. Ю. Яковлева**, **И. Ф. Беленичев**, **А. В. Абрамов**, **Н. А. Горчакова**

### **Сравнительный анализ влияния таурина и пирацетама на морфологические изменения головного мозга крыс при циркуляторной гипоксии**

*Експериментальними дослідженнями на крысах встановлено нейропротекторне діє таурина in vitro, а також in vivo в порівнянні з пирацетамом по відношенню до морфологічних показателів головного мозку крыс при циркуляторній гіпоксії.*

**Yu. M. Kolesnik**, Corresponding Member of NAS of Ukraine **I. S. Chekman**,  
**I. Yu. Yakovleva**, **I. F. Belenichev**, **A. V. Abramov**, **N. A. Gorchakova**

### **Comparative analysis of the influence of taurine and piracetam on the morphological changes in rats' brain with circulatory hypoxia**

*By the experimental investigations on rats, the neuroprotective action of taurine in vitro and in vivo comparatively with piracetam on morphological changes in brain during circulatory hypoxia is established.*

М. А. Пілінська, С. С. Дибський, О. Б. Дибська, Л. І. Швайко,  
В. О. Сушко

## Реалізація прихованої хромосомної нестабільності в лімфоцитах периферичної крові учасників ліквідації аварії на Чорнобильській АЕС, хворих на рак легенів

(Представлено академіком НАН України Д. М. Гродзинським)

*За допомогою модифікованого тесту “G<sub>2</sub>-bleomycin sensitivity assay” визначено надфоновий цитогенетичний ефект, величина якого вважається маркером прихованої хромосомної нестабільності (ПХН), в учасників ліквідації наслідків Чорнобильської аварії, хворих на рак легенів. Виявлено істотні міжіндивідуальні коливання індукованого цитогенетичного ефекту та відсутність позитивної кореляції між фоновими та надфоновими частотами хромосомних аберацій, що обумовлено індивідуальною чутливістю до мутагенної дії блеоміцину. Зроблено припущення про існування асоціації між радіаційно-індукованим підвищенням генетично детермінованої індивідуальної чутливості до тестуючого мутагенного навантаження та реалізацією онкологічної патології у опромінених осіб. Підтверджено доцільність використання тесту “G<sub>2</sub>-bleomycin sensitivity assay” при медичному обстеженні опромінених контингентів для визначення величини ПХН як одного з інформативних маркерів схильності до онкологічних захворювань.*

Одним із проявів нестабільності геному в соматичних клітинах людини є прихована хромосомна нестабільність (ПХН), маркером якої вважається величина надспонтанного (надфонового) цитогенетичного ефекту, індукованого *in vitro* так званими мутагенами-провокаторами, найчастіше — радіоміметиком блеоміцином у тесті “G<sub>2</sub>-bleomycin sensitivity assay” [1]. Ступінь вияву такого ефекту залежить від індивідуальної чутливості до тестуючого мутагенного навантаження, яка є генетично зумовленою ознакою [1].

У наших попередніх дослідженнях модифікований тест “G<sub>2</sub>-bleomycin sensitivity assay” [2] було використано при цитогенетичному обстеженні умовно здорових осіб та учасників ліквідації наслідків аварії на Чорнобильській АЕС (УЛНА) з різними дозами опромінення [3], а також хворих на рак легенів (РЛ), які заперечували свідомий контакт зі знічними чи потенційними мутагенами [4]. Отримані результати підтвердили можливість радіаційно-індукованої модифікації генетично детермінованої чутливості хромосом соматичних клітин людини до тестуючого мутагенного навантаження блеоміцином, що призводить до підвищення частоти зустрічальності осіб із ПХН, а також доцільність використання тесту “G<sub>2</sub>-bleomycin sensitivity assay” для визначення ПХН як одного з маркерів схильності до онкологічних захворювань [4].

Для визначення можливої асоціації між радіаційно-індукованим підвищенням індивідуальної чутливості до тестуючої мутагенної дії блеоміцину та можливістю реалізації онкопатології наші подальші дослідження були спрямовані на цитогенетичні обстеження онкологічних хворих, які зазнали радіаційного впливу внаслідок аварії на ЧАЕС. З цією метою нами були обстежені 15 УЛНА з діагнозом РЛ (верифікованим у відділенні пульмонології відділу терапії радіаційних наслідків Інституту клінічної радіології ННЦРМ НАМН Ук-

раїни) до використання радіо- чи хіміотерапії. Усі пацієнти — чоловічої статі, віком 45–82 роки, середній вік 58 років; з них 9 — курці тютюну; 6 — заперечували тютюнопаління. Офіційні дози опромінення в цій групі коливались від 24,2 до 180,4 мГр і становили в середньому 57,8 мГр.

У обстежених осіб визначали фонові (вихідні) частоти всього спектра хромосомних аберацій в лімфоцитах периферичної крові та індивідуальну чутливість до кластогенної дії блеоміцину *in vitro* за розробленим нами алгоритмом [2].

Умови культивування лімфоцитів, принципи проведення цитогенетичного аналізу, обчислення коефіцієнта ПХН ( $K_{ПХН}$ ) для визначення індивідуальної чутливості до дії блеоміцину відповідали таким, що були наведені в наших попередніх публікаціях [3, 4]. Кількість проаналізованих клітин для кожної з обстежених осіб коливалась від 200 до 500 метафаз; усього проаналізували 16 900 метафаз.

У табл. 1 наведені середньогрупові фонові та індуковані блеоміцином *in vitro* (у концентраціях 0,05 та 5,00 мкг/мл) частоти цитогенетичних показників у групі УЛНА з діагнозом РЛ. Для оцінки, аналізу та порівняння одержаних даних використовували результати цитогенетичного обстеження осіб з діагнозом РЛ, які заперечували свідомий контакт з радіаційним чинником, проведеного нами на попередніх етапах досліджень [4].

Згідно з одержаними даними (див. табл. 1), у групі УЛНА з діагнозом РЛ середньогрупові фонові частоти абераційних метафаз ( $2,67 \pm 0,19\%$ ) та хромосомних аберацій ( $2,96 \pm 0,20$  на 100 клітин) не перевищували верхньої межі середньопопуляційного рівня, який у  $\sim 98\%$  випадків знаходився в межах від 1,00 до 3,00% [5], та майже збігалися з відповідними значеннями цих показників у неопромінених осіб з РЛ —  $2,51 \pm 0,20\%$  та  $2,54 \pm 0,20$  на 100 клітин відповідно [4].

Серед пошкоджень хромосом домінували ацентрики — одиночні та вільні парні фрагменти із середньогруповими частотами  $1,39 \pm 0,14$  та  $0,95 \pm 0,12$  на 100 клітин відповідно, що знаходилося в межах середньопопуляційного рівня спонтанного хромосомного мутагенезу в лімфоцитах периферичної крові людини [5] та достовірно не відрізнялось від аналогічних показників у групі осіб з РЛ, які заперечували свідомий контакт з іонізуючим випромінюванням ( $1,58 \pm 0,16$  та  $0,63 \pm 0,10$  на 100 клітин відповідно) [4].

Разом з тим середньогрупова фонові частота суми нестабільних маркерів радіаційної дії (дицентрики + центричні кільця) у УЛНА з РЛ становила  $0,35 \pm 0,05$  на 100 метафаз, що вірогідно ( $p < 0,05$ ) перевищувало таку як у групі онкологічних хворих без радіаційного впливу ( $0,11 \pm 0,04$  на 100 метафаз), так і в популяційному контролі ( $0,08 \pm 0,03$  на 100 клітин) [4, 5]. Водночас, частота стабільних маркерів радіаційної дії (атипових моноцентриків) в УЛНА з онкопатологією ( $0,16 \pm 0,05$  на 100 метафаз) достовірно не перевищувала ( $p > 0,05$ ) аналогічний показник у осіб, хворих на РЛ без радіаційного впливу ( $0,08 \pm 0,03$  на 100 метафаз) [4].

Після дії блеоміцину в концентрації 0,05 мкг/мл спостерігали вірогідне зростання ( $p < 0,01$ ) середньогрупових частот абераційних метафаз та аберацій хромосом ( $12,02 \pm 0,44\%$  та  $46,83 \pm 0,67$  на 100 метафаз відповідно) порівняно з аналогічними показниками в інтактних культурах ( $2,67 \pm 0,19\%$  та  $2,96 \pm 0,20$  на 100 метафаз відповідно). Разом з тим при порівнянні частоти інтегральних цитогенетичних показників не виявили статистично значущих відмінностей у осіб з онкопатологією з та без додаткового радіаційного впливу.

Середня частота аберацій на одну абераційну метафазу в обох групах перевищувала 1 і становила 3,90 та 4,94 відповідно, внаслідок індукції клітин із множинними хромосомними абераціями.

Таблиця 1. Результати цитогенетичного обстеження УЛНА з діагнозом РЛ (середньогрупові дані),  $M \pm m$ 

Аберантні клітини, %	Хромосомні аберації, на 100 клітин	Частота аберацій хроматидного типу, на 100 клітин			Частота аберацій хромосомного типу, на 100 клітин					
		Одиночні фрагменти	Обміни	Сума	Парні фрагменти	Дицентрики	Центричні кільця	Аномальні моноцентрики	Ацентричні кільця	Сума
$2,67 \pm 0,19$	$2,96 \pm 0,20$	$1,39 \pm 0,14$	$0,03 \pm 0,02$	$1,42 \pm 0,14$	$0,95 \pm 0,12$	$0,27 \pm 0,06$	$0,07 \pm 0,03$	$0,17 \pm 0,05$	$0,10 \pm 0,04$	$1,55 \pm 0,15$
		Без додавання блеоміцину								
		З додаванням блеоміцину в концентрації 0,05 мкг/мл								
$12,02 \pm 0,44$	$46,83 \pm 0,67$	$31,79 \pm 0,63$	$0,06 \pm 0,03$	$31,86 \pm 0,63$	$14,47 \pm 0,47$	$0,30 \pm 0,07$	$0,03 \pm 0,02$	$0,16 \pm 0,05$	$0,01 \pm 0,01$	$14,98 \pm 0,48$
		З додаванням блеоміцину в концентрації 5,00 мкг/мл								
$22,28 \pm 0,64$	$80,28 \pm 0,61$	$52,27 \pm 0,77$	$0,15 \pm 0,06$	$52,43 \pm 0,77$	$27,87 \pm 0,69$	$0,27 \pm 0,08$	$0,02 \pm 0,02$	$0,20 \pm 0,07$	$0,17 \pm 0,06$	$28,52 \pm 0,69$



Серед пошкоджень хромосом знов-таки значно домінували вільні ацентрики переважно хроматидного типу (одиначні ацентричні фрагменти) — як у окремих осіб, так і по групі в середньому, що не тільки характерно для кластогенної дії блеоміцину, але й вважається цитогенетичними маркерами хромосомної нестабільності. Частота обмінних аберацій хроматидного (хроматидні обміни) та хромосомного (дицентрики, кільцеві хромосоми, атипові моноцентрики) типів залишилась незмінною.

При аналізі індивідуальних результатів цитогенетичних досліджень при дії блеоміцину в концентрації 0,05 мкг/мл у онкохворих УЛНА, як і в групі осіб з РЛ без додаткового радіаційного навантаження, спостерігали велику міжіндивідуальну варіабельність цитогенетичного ефекту, яка не залежала від величини фонових даних, одержаних в інтактних культурах. Міжіндивідуальний розмах частоти хромосомних аберацій у групі онкохворих УЛНА становив 16,86–99,50 на 100 клітин (при 8,20–109,25 на 100 метафаз у групі хворих на РЛ без додаткового радіаційного впливу), тобто як окремі індивіди, так і обстежена група в цілому виявилися чутливими до тестуючої дії блеоміцину в концентрації 0,05 мкг/мл.

У групі онкохворих УЛНА при дії блеоміцину в концентрації 5,00 мкг/мл (див. табл. 1) достовірно підвищився середньогруповий рівень абераційних метафаз та хромосомних аберацій — до  $22,28 \pm 0,64\%$  та  $80,28 \pm 0,61$  на 100 метафаз відповідно, але середня кількість аберацій в одній абераційній клітині не тільки майже не змінилась, але й виявила тенденцію до зниження і становила 3,60, що може бути зумовлено цитотоксичною дією більш високої концентрації блеоміцину. Основним типом хромосомних пошкоджень, індукованих блеоміцином, залишились прості аберації — одиначні та парні ацентрики.

Основні закономірності цитогенетичного відгуку групи УЛНА з РЛ на дію блеоміцину в концентрації 5,00 мкг/мл відповідали таким, виявленим при навантаженні культури лімфоцитів блеоміцином у концентрації 0,05 мкг/мл, але з більш вираженим цитогенетичним ефектом.

Для порівняльної оцінки реакції хромосомного апарату осіб з обох груп онкохворих на дію блеоміцину використали два інтегральні критерія — відсоток осіб, гіперчутливих до дії блеоміцину, визначений за величиною коефіцієнта ПХН ( $K_{ПХН}$ , який при підвищеній чутливості до дії мутагенів-провокаторів перевищує 1), та середньогруповий додаток до фонові частоти хромосомних аберацій (надспонтанний рівень) у тесті “G<sub>2</sub>-bleomycin sensitivity assay”. Індивідуальні значення  $K_{ПХН}$  в обстежених групах наведені в табл. 2.

На підставі величин  $K_{ПХН}$  розраховували кількість осіб з прихованою хромосомною нестабільністю:

53,3% у групі хворих на рак легенів без додаткового радіаційного впливу, що підтверджує літературні дані щодо підвищення індивідуальної чутливості пацієнтів з реалізованою онкологічною патологією до дії мутагенів-провокаторів *in vitro* [6, 7];

66,6% у групі УЛНА, хворих на рак легенів, що дозволяє припустити обтяження прогнозу щодо реалізації онкопатології у гіперчутливих до дії блеоміцину осіб внаслідок індукції хромосомної нестабільності додатковим радіаційним впливом.

Аналогічні висновки можна зробити і на підставі аналізу величин надфонового цитогенетичного ефекту, індукованого блеоміцином в обстежених групах (табл. 3). Як видно з наведених даних, максимальний відсоток осіб з прихованою хромосомною нестабільністю (66,6%), як і максимальний додаток до середньогрупової частоти аберацій хромосом (77,32 на 100 метафаз при концентрації блеоміцину 5,00 мкг/мл), виявився в групі УЛНА з діагнозом РЛ.

Таблиця 2. Індивідуальні коефіцієнти прихованої хромосомної нестабільності ( $K_{ПХН}$ ) в онкологічних хворих без та з додатковим радіаційним впливом

№ п/п	Онкологічні хворі, без додаткового радіаційного впливу [4]		Онкологічні хворі, які брали участь в ліквідації наслідків аварії на ЧАЕС	
	0,05 мкг/мл	5,00 мкг/мл	0,05 мкг/мл	5,00 мкг/мл
1	<b>2,32</b>	<b>1,78</b>	0,99	<b>1,21</b>
2	0,21	0,65	<b>2,17</b>	<b>1,20</b>
3	0,17	0,41	0,39	0,94
4	<b>1,32</b>	<b>1,18</b>	0,81	0,64
5	0,34	1,15	0,39	0,54
6	0,85	0,98	<b>1,55</b>	0,88
7	0,74	0,93	<b>1,33</b>	0,77
8	0,81	1,22	0,80	<b>1,03</b>
9	<b>1,33</b>	<b>1,08</b>	<b>1,26</b>	<b>1,14</b>
10	<b>1,59</b>	<b>1,11</b>	<b>1,03</b>	0,90
11	1,79	0,83	0,37	0,64
12	0,89	0,88	<b>1,72</b>	<b>3,13</b>
13	0,36	0,81	0,61	<b>1,23</b>
14	<b>1,69</b>	<b>1,31</b>	0,99	<b>1,83</b>
15	0,59	0,67*	0,92	0,90

Таблиця 3. Порівняння середньогрупових даних цитогенетичного обстеження хворих на РЛ без радіаційного впливу та після професійного контакту з іонізуючим випромінюванням при використанні тесту "G<sub>2</sub>-bleomycin sensitivity assay"

Група хворих на РЛ	Гіперчутливі особи, %	Додаток до фонові частоти аберацій, на 100 клітин	
		0,05 мкг/мл	5,00 мкг/мл
Без радіаційного впливу [4]	53,3	44,59	53,41
УЛНА	66,6	43,87	77,32

Отримані результати не тільки підтвердили можливість радіаційно-індукованої модифікації генетично детермінованої чутливості хромосом соматичних клітин людини до тестуючого мутагенного навантаження блеоміцином, але й дозволили припустити існування асоціації між радіаційно-індукованим підвищенням генетично зумовленої індивідуальної чутливості до тестуючої мутагенної дії блеоміцину та реалізацією онкологічної патології в опромінених осіб.

1. Au W. W. Mutagen sensitivity assays in population studies // Mutat. Res. – 2003. – 544, Iss. 2-3. – P. 273-277.
2. Цитогенетичний спосіб визначення прихованої хромосомної нестабільності в соматичних клітинах людини за допомогою тесту "G<sub>2</sub>-bleomycin sensitivity assay": Метод. рекомендації / Уклад. М. А. Пілінська, С. С. Дибський, О. Б. Дибська, Л. Р. Педан; Державна установа "Науковий центр радіаційної медицини АМН України". – Київ, 2008. – 25 с.
3. Дибський С. С., Дибська О. Б., Педан Л. Р., Пілінська М. А. Виявлення прихованої хромосомної нестабільності у осіб, постраждалих від дії факторів Чорнобильської аварії, за допомогою удосконаленого тесту "G<sub>2</sub>-bleomycin sensitivity assay" // Доп. НАН України. – 2009. – № 11. – С. 191-195.
4. Пілінська М. А., Дибський С. С., Дибська О. Б., Швайко Л. І. Використання модифікованого тесту "G<sub>2</sub>-bleomycin sensitivity assay" для виявлення прихованої хромосомної нестабільності у хворих на рак легенів // Доп. НАН України. – 2011. – № 10. – С. 156-161.
5. Бочков Н. П., Чеботарев А. Н., Катосова Л. Д., Платонова В. И. База данных для анализа количественных характеристик частоты хромосомных aberrаций в культуре лимфоцитов периферической крови человека // Вестн. РАМН. – 2001. – № 2. – С. 21-29.

6. Szekely G., Remenar E., Rfsler M. et al. Does the bleomycin sensitivity assay express cancer phenotype? // *Mutagenesis*. – 2003. – **18**, No 1. – P. 59–63.
7. Spitz M. Mutagen sensitivity as a marker of cancer susceptibility // *Cancer Detect. Prev.* – 2005. – **19**, No 1. – P. 35.

ДУ “Національний науковий центр радіаційної медицини НАМН України”, Київ

Надійшло до редакції 23.01.2012

**М. А. Пилинская, С. С. Дыбский, Е. Б. Дыбская, Л. И. Швайко,  
В. А. Сушко**

### **Реализация скрытой хромосомной нестабильности в лимфоцитах периферической крови участников ликвидации аварии на Чернобыльской АЭС, больных раком легких**

*С помощью модифицированного теста “G<sub>2</sub>-bleomycin sensitivity assay” определен надфоновый цитогенетический эффект, величина которого считается маркером скрытой хромосомной нестабильности (СХН), у участников ликвидации последствий Чернобыльской аварии, больных раком легких. Обнаружены существенные межиндивидуальные колебания индуцированного цитогенетического эффекта и отсутствие положительной корреляции между фоновыми и надфоновыми частотами хромосомных aberrаций, что обусловлено индивидуальной чувствительностью к мутагенному действию блеомицина. Сделано предположение о существовании ассоциации между радиационно-индуцированным повышением генетически детерминированной индивидуальной чувствительности к тестирующей мутагенной нагрузке и реализацией онкологической патологии у облученных лиц. Подтверждена целесообразность использования теста “G<sub>2</sub>-bleomycin sensitivity assay” при медицинском обследовании облученных контингентов для определения величины СХН как одного из информативных маркеров предрасположенности к онкологическим заболеваниям.*

**М. А. Pilinskaya, S. S. Dibskiy, Ye. B. Dibskaya, L. I. Shvayko, V. A. Sushko**

### **Realization of hidden chromosome instability in peripheral blood lymphocytes of the Chernobyl accident clean-up workers with lung cancer**

*With the help of the modified “G<sub>2</sub>-bleomycin sensitivity assay”, the hidden chromosome instability (HCI) in patients with lung cancer occupationally exposed to ionizing radiation under the liquidation of consequences of the Chernobyl accident has been evaluated. The essential interindividual variability in the addition to the background frequency of chromosome aberrations (above spontaneous cytogenetic effect), as well as the absence of positive correlation between background and induced frequencies of chromosome damages due to different individual sensitivities to the testing mutagenic exposure, has been established. The existence of the association between the radiation-induced increase of a genetically determined individual susceptibility to the bleomycin exposure and the realization of cancer pathology in irradiated individuals has been suggested. The data obtained confirm the feasibility of using the “G<sub>2</sub>-bleomycin sensitivity assay” in the medical examination of irradiated contingents for the determination of HCI value as one of the informative markers of the predisposition to oncological diseases.*



УДК 678.021:628.1

© 2012

Академік НАН України **В. В. Гончарук, О. С. Савлук,  
М. М. Саприкіна, А. В. Руденко**

### Технологія очистки води від мікроміцетів

*Розроблено нову конструкцію електрокоагуляційної комірки з інертним анодом. Встановлено раціональні робочі параметри електрокоагуляційної комірки, а саме: густину струму, площу електродів та сталевих пластин. Запропоновано технологічну схему очистки води від мікроміцетів, в основу якої покладено використання електрокоагуляційної комірки з інертним анодом, фільтраційне завантаження та УФ обробку води. Застосування даної технології забезпечує високий ступінь знезараження води від опортуністичних грибів родів *Candida* та *Aspergillus*.*

В усьому світі спостерігається заміна патогенного бактеріального компонента більш агресивним грибним, який вважають умовно-патогенним, не враховуючи та не припускаючи його потенційних агресивних можливостей. У зв'язку з різким збільшенням кількості хворих, що страждають від системних і локальних мікозів, цій проблемі приділяється велика увага щодо виявлення окремих видів мікроміцетів при оцінці інфекційної небезпеки навколишнього середовища [1]. Останнім часом все більше авторів присвячують свої роботи дослідженню мікроміцетів, продуктів їх життєдіяльності у воді та їх впливу на здоров'я людини і тварин [2–8]. Однак, незважаючи на небезпечність та поширення цієї групи мікроорганізмів, кількість робіт стосовно їх вилучення з води незначна.

Серед розглянутих нами раніше способів очистки та знезараження води від мікроміцетів ефективніший виявився метод коагуляції [9]. Однак при широкому використанні вказаного методу обробки води на станціях водопідготовки була встановлена наявність мікроміцетів у водопровідній воді, що надходить до споживача [10]. Тому виникає необхідність створення компактних установок з автоматичним керуванням, застосування яких дає змогу надходження води в пунктах споживання. Для спрощення процесу обслуговування таких об'єктів використано електрохімічний спосіб отримання коагулянта, в даному випадку використано сталевий матеріал анода. Утворення гідроксиду  $Fe^{3+}$  відбувається через стадію окиснення заліза (II). Відомо, що перехід  $Fe^{2+}$  у  $Fe^{3+}$  відбувається за допомогою різних окиснювачів.

Матеріал електродів багато в чому визначає кількість утворених електрохімічним способом окиснювальних агентів, здатних самостійно знезаражувати воду від мікроорганізмів. Проведено серію експериментів з порівняння ступеня знезараження води з використан-

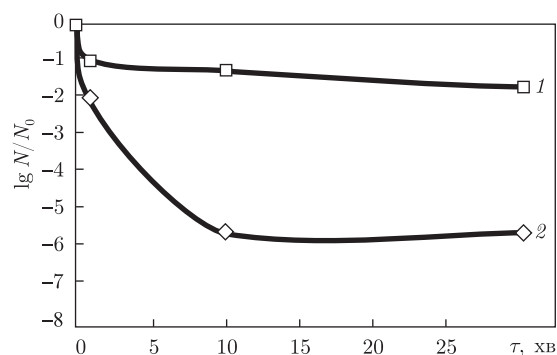


Рис. 1. Залежність ефективності очистки води від тривалості контакту суміші окиснювальних агентів електролізної комірки з клітинами мікроскопічних грибів: 1 — *Aspergillus niger*; 2 — *Candida albicans*

ням платиново-титанового (ПТА) та графітового анодів марки ТУ 48-20-12-87 на прикладі культури *Candida albicans*. Для виготовлення катода використано нержавіючу сталь марки 12-Х-18Н10Т.

Використання комірки, яка містить ПТА, є більш доцільним, так як забезпечує вищий фунгіцидний ефект у порівнянні з ефектом, отриманим для комірки з графітовим анодом, що, ймовірно, є результатом утворення більшої кількості окиснювальних агентів. Розроблено макетний зразок електролізної комірки з ПТА та встановлено основні параметри його роботи в проточному режимі при об'ємній швидкості від 1,5 до 6,0 дм<sup>3</sup>/год.

Продукти електролізу, що були отримані, мають високу антимікробну дію по відношенню до культури дріжджеподібного гриба *C. albicans*. Однак їх фунгіцидна дія значно послаблюється при наявності у воді міцеліальних грибів роду *Aspergillus* (рис. 1). Очевидно, що самостійне використання окисників при очистці води від мікроскопічних грибів є недоцільним, оскільки високі дози реагентів не забезпечують необхідного ступеня вилучення мікроорганізмів з води.

Проведено серію експериментів з поєднання електрокоагуляції з подальшим окисненням Fe<sup>2+</sup>, отриманого шляхом розчинення сталевого анода, продуктами електролізу, що утворюються на інертному аноді. Отримано результати, що свідчать про доцільність поєднання електрокоагуляції з подальшою обробкою води продуктами електролізу, утвореними на інертному аноді. Така комбінація методів дає змогу забезпечити високий ступінь вилучення мікроміцетів з води за рахунок практично повного переведення Fe<sup>2+</sup> у Fe<sup>3+</sup>, а отже, швидкого утворення гідроксиду заліза, який прискорює седиментацію мікроскопічних клітин грибів. Враховуючи дані кількісного співвідношення Fe<sup>2+</sup>/Fe<sup>3+</sup>, площу платинового анода прийнято рівною 2,8 см<sup>2</sup> (2,0 × 1,4).

Таким чином, запропонована обробка води з поетапним внесенням реагентів дозволяє швидко отримувати коагулянт заліза з подальшим його вилученням при фільтруванні крізь паперові фільтри.

З метою зменшення габаритних розмірів та ваги за рахунок виключення поетапних етапів внесення реагентів та скорочення кількості джерел живлення нами запропоновано нову конструкцію електрокоагуляційної комірки, яка містить платиновий анод та катод з нержавіючої сталі. Причому використано металеві, а саме сталеві, пластини (сталь-3), що розміщено в одній площині з платиновим анодом. Підведення струму відбувалося до інертного анода, а залізний коагулянт отримано за рахунок розчинення металевих пластин в утвореному електричному полі платинового анода та катода з нержавіючої сталі, а також

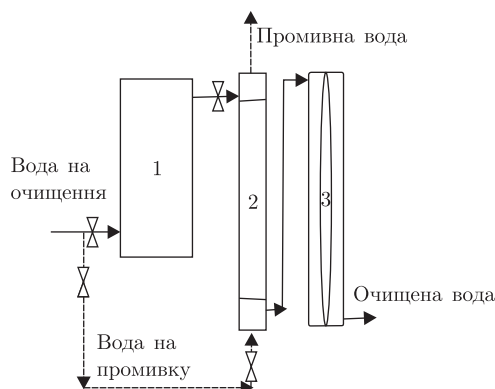


Рис. 2. Принципова технологічна апаратурна схема очистки води: 1 — вдосконалена конструкція апарата з отримання коагулянта; 2 — фільтр-АГ; 3 — апарат УФ-випромінення

за рахунок часткового їх хімічного розчинення продуктами електролізу, що утворюються на інертному аноді [11].

Згідно з попередніми результатами, обрано оптимальну концентрацію коагулянта для очистки води від мікроміцетів, яка становить близько  $5 \text{ мг/дм}^3$  у перерахунку на  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ . Встановлено ряд технологічних параметрів роботи електрокоагуляційної комірки, при яких досягається високий ступінь очистки води від мікроміцетів. Так, об'ємна витрата води становить  $1,5 \text{ дм}^3/\text{год}$ , густина струму —  $21 \text{ мА/см}^2$ , площа поверхонь сталевих пластин та платиного анода дорівнює  $3 \text{ см}^2$  й  $2,8 \text{ см}^2$  відповідно, напруга на електродах —  $9,9 \text{ В}$ , питома витрата електроенергії становить  $0,4 \text{ кВт} \cdot \text{год/м}^3$ , витрата іонів заліза при цьому —  $4,9 \text{ мг/год}$ . Розміри залізних пластин (2 шт.) електрокоагулятора прийнято  $2,0 \times 0,75$ .

Оскільки в процесі роботи електрокоагуляційної комірки утворюється гідроксид заліза з абсорбованими клітинами мікроміцетів, важливо підібрати ефективний фільтр для їх видалення. На сьогодні з метою високоефективної очистки води від заліза (III) використовують гранульований силікат алюмінію (фільтр-АГ), який має ряд переваг у порівнянні з іншими завантаженнями.

Встановлено, що самостійне використання фільтра-АГ практично не затримує клітини мікроскопічних грибів. Тож цей фільтруючий матеріал (з заданою об'ємною швидкістю фільтрування) не може бути використаний як самостійний спосіб видалення мікроміцетів, оскільки у відфільтровану воду надходить майже вихідна кількість мікроміцетів.

Запропоновано технологічну схему очистки води від мікроміцетів, яка включає: електрокоагуляційну обробку води в комірці з ПТА з подальшим фільтруванням крізь гранульований силікат алюмінію (фільтр-АГ). Така схема також може містити вузол контрольного знезараження води УФ-випромінюванням (рис. 2). Для оцінки ефективності запропонованої схеми проведено серію експериментів з порівняння результатів по видаленню культур дріжджеподібних грибів *S. albicans* та міцеліальних грибів *Aspergillus niger* в удосконаленій електрокоагуляційній комірці, електролізній комірці, що не містить сталевих пластин, а також методом об'ємної коагуляції з використанням  $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ , з подальшим їх фільтруванням крізь зернисте завантаження при об'ємній швидкості фільтрування  $3 \text{ дм}^3/\text{год}$ . Експериментально доведено, що використання вдосконаленого електрокоагуляційного апарата, що містить ПТА, з подальшим фільтруванням крізь зернисте завантаження філь-

тра-AG (див. рис. 2), дає змогу скоротити час отримання гідроксиду заліза та підвищити ступінь видалення мікроскопічних грибів з води.

На підставі отриманих даних розроблено апарат (установку) для видалення з води мікроміцетів, який отримав назву УОК-М (установка з отримання коагулянта для очистки води від мікроміцетів). Апарат УОК-М — пристрій переносного типу, що працює в проточно-напірному режимі, загальною вагою 1,5 кг, складається з корпусу розмірами  $180 \times 170 \times 80$  мм та шнура з штепсельною вилкою для підключення до джерела живлення напругою 220 В. На передній стінці апарата знаходяться патрубки для входу та виходу води, яка піддається обробці. На бічній стінці апарата є ручка регулювання струму, що подається. У корпусі апарата змонтовано електрокоагуляційну комірку для отримання коагулянта та блок стабілізації струму, з допомогою якого здійснюється живлення апарата в заданому режимі.

Основним показником ефективності роботи апарата УОК-М є надійність видалення мікроміцетів з води. З цією метою оцінку ефективності апарата проводили з використанням культур дріжджеподібного гриба *C. albicans* та міцеліального гриба *A. niger*. Ефективність очистки води демонструє табл. 1. З отриманих даних видно, що при проходженні води (з вихідним зараженням  $1,2 \cdot 10^5$  КУО/см<sup>3</sup> культурою *C. albicans*) крізь апарат УОК-М та фільтр-AG вже за 5 хв рівень контамінації води знижується на чотири порядки, а за 60 хв досягається повна її очистка. У випадку меншої кількості вихідного навантаження води культурою *C. albicans* спостерігається зменшення часу, необхідного для повної очистки. Так, при концентрації  $1,8 \cdot 10^4$  КУО/см<sup>3</sup> вже за 5 хв відбувається практично повне видалення культури з води.

При очистці води, забрудненої культурою *A. niger* ( $1,4 \cdot 10^5$  КУО/см<sup>3</sup>), шляхом електрокоагуляційної обробки води з подальшим її фільтруванням крізь фільтр-AG, спостерігається вилучення 99,99% клітин культури вже за 5 хв роботи технологічної схеми, повна очистка води від мікроміцетів спостерігається за 60 хв. При пропусканні води, забрудненої культурою *A. niger*, у концентрації  $1,4 \cdot 10^4$  КУО/см<sup>3</sup> крізь електрокоагуляційну комірку та зернисте завантаження фільтра-AG вже за 5 хв роботи апарата відбувається практично повне видалення мікроскопічного гриба *A. niger* з води (див. табл. 1). Промивні води, що утворилися після роботи фільтра, необхідно знезаражувати термічно в автоклаві.

Таким чином, запропонована технологія очистки води від мікроміцетів, що включає послідовне пропускання її крізь електрокоагуляційний апарат УОК-М з інертним анодом та фільтруюче зернисте завантаження — фільтр-AG, дає змогу очистити воду від цієї групи мікроорганізмів і може бути впроваджена у виробництво. Крім того, важливо відзначити, що запропонована конструкція може бути покладена в основу розробки нових установок з знезараження води від широкого спектра мікроорганізмів, включаючи віруси.

Таблиця 1. Ефективність очистки води від мікроміцетів з використанням запропонованої технологічної схеми

Культура	Вихідна концентрація, КУО/см <sup>3</sup>	Вміст культури у воді після очистки, КУО/см <sup>3</sup>	
		через 5 хв	через 60 хв
<i>Candida albicans</i>	$1,8 \cdot 10^4$	1	0
	$1,2 \cdot 10^5$	12	0
<i>Aspergillus niger</i>	$1,1 \cdot 10^3$	0	0
	$1,6 \cdot 10^4$	8	0
	$1,4 \cdot 10^5$	75	2

1. Гончарук В. В., Руденко А. В., Савлук О. С. и др. Проблема инфицирования воды возбудителями микозов и перспективы ее решения // Химия и технология воды. – 2004. – **26**, № 2. – С. 120–144.
2. Gray M. Molds and mycotoxins: beyond allergies and asthma // Altern. Ther. Health Med. – 2007. – **13**, No 2. – P. 146–152.
3. Mazur L. J., Kim J. Spectrum of noninfectious health effects from molds // Pediatrics. – 2006. – **118**, No 6. – P. 1909–1926.
4. Etzel R. A. What the primary care pediatrician should know about syndromes associated with exposures to mycotoxin // Curr. Probl. Pediatr. Adol. Health Care. – 2006. – **36**, No 8. – P. 282–305.
5. Yu J., Cleveland T. E., Nierman W. C., Bennett J. W. Aspergillus flavus genomics: gateway to human and animal health, food safety, and crop resistance to diseases // Rev. Iberoamer. Micol. – 2005. – **22**. – P. 194–202.
6. Pitt J. I., Hocking A. D. Mycotoxins in Australia: biocontrol of aflatoxin in peanuts // Mycopathologia. – 2006. – **162**, No 3. – P. 233–243.
7. Wood G. E. Mycotoxins in foods and feeds in the United States // J. Anim. Sci. – 1992. – **70**, No 12. – P. 3941–3949.
8. Смирнов В. В., Зайченко А. М., Рубежнук И. Г. Микотоксины: фундаментальные и прикладные // Совр. пробл. токсикологии. – 2000. – № 1. – С. 5–12.
9. Гончарук В. В., Руденко А. В., Савлук О. С. та ін. Мікроміцети в питній воді та шляхи її знезараження // Доп. НАН України. – 2008. – № 11. – С. 187–191.
10. Гончарук В. В., Руденко А. В., Коваль Э. З. та ін. Мікроміцети в питній воді // Вісн. НАН України. – 2007. – № 12. – С. 21–24.
11. Пат. 95857 Україна. МПК<sup>11</sup> С 02 F 1/463. Электрокоагулятор для очистки воды / В. В. Гончарук, А. В. Руденко, О. С. Савлук, М. М. Саприкина. – Заяв. № а 2010 03562; Опубл. 12.09.2011; Бюл. № 17.

*Институт колоїдної хімії та хімії води  
ім. А. В. Думанського НАН України, Київ  
Институт урології АМН України, Київ*

*Надійшло до редакції 02.03.2012*

**Академик НАН Украины В. В. Гончарук, О. С. Савлук, М. Н. Сапрыкина,  
А. В. Руденко**

### **Технология очистки воды от микромицетов**

*Разработана новая конструкция электрокоагуляционной ячейки с инертным анодом. Определены рациональные рабочие параметры электрокоагуляционной ячейки, а именно: плотность тока, площадь электродов и стальных пластин. Предложена технологическая схема очистки воды от микромицетов, которая состоит из электрокоагуляционной ячейки с инертным анодом, фильтрационной загрузки и УФ обработки воды. Использование данной технологии обеспечивает высокую степень обеззараживания воды от оппортунистических грибов родов *Candida* и *Aspergillus*.*

**Academician of the NAS of the Ukraine V. V. Goncharuk, O. S. Savluk,  
M. N. Saprykina, A. V. Rudenko**

### **A technology of water purification from microscopic fungi**

*The new design of an electrocoagulation cell with inert anode is developed. Optimal operation parameters of the electrocoagulation cell (density of a current, and areas of electrodes and steel plates) are determined. The technological scheme of microscopic fungi removal from water is offered. This scheme consists from electrocoagulation cell, filtration loading, and UV treatment. The use of the given technology provides a high degree of water disinfection from the opportunistic fungi *Candida* and *Aspergillus*.*