

УДК 539.3

Журавльова З. Ю., аспірант,  
Нерух Д. О., д. х. н., ст. викл.,  
Реут В. В., к. ф.-м. н., доцент,  
Козачков Д. Г., магістр,  
Вайсфельд Н. Д., д. ф.-м. н., проф.

### Про напружений стан вірусу PCV2

Астонський університет, Бірмінгем B4 7ET,  
Астон Тріангл  
Одеський національний університет імені  
І. І. Мечникова, 65082, м. Одеса, вул.  
Дворянська, 2  
e-mail: zhuravleva@te.net.ua

Z. Yu. Zhuravlova, Postgraduate Student,  
D. A. Nerukh, Dr. Sci. (Chem.), Senior Lecturer,  
V. V. Reut, Dr. Sci. (Phys.-Math.),  
D. G. Kozachkov, Master Student,  
N. D. Vaysfel'd, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof

### On stress state of the PCV2 virus

Aston University, Birmingham B4 7ET, Aston  
Triangle  
Odessa I. I. Mechnikov National University, 65082,  
Odessa, Dvoryanskaya str., 2  
e-mail: zhuravleva@te.net.ua

*Вірус капсид PCV2 досліджується за допомогою побудови ідеалізованої моделі вірусу. Вона описується тривимірною динамічною задачею теорії пружності, що сформульована у сферичній системі координат для випадку стаціонарних коливань. Крайова задача розв'язується за допомогою методу інтегральних перетворень та методу розривних розв'язків. У результаті отриманий точний розв'язок задачі. Отримано числові розрахунки пружних характеристик вірусу.*

*Ключові слова: вірус капсид PCV2, порожня сфера, акустичне середовище, інтегральне перетворення, розривні розв'язки.*

*The virus capsid PCV2 is investigated by the construction of the idealized virus model. It is described by the 3-D dynamical elasticity problem formulated in the spherical coordinate system for the steady-state oscillation process. The virus is modeled as the hollow elastic sphere, which is surrounded and fulfilled with the two different acoustic mediums. The integral Fourier and Legendre transformations were applied to the stated initial-boundary value problem. With the help of the discontinuous solutions' method the expressions for the displacements and acoustic potentials were derived in the exact form depending on the unknown jumps of the displacements and stresses. The conditions at the virus surfaces allowed to express the displacement and stress jumps via jumps of the acoustic potentials, which were obtained after solving of the two linear equations system. As a result, the exact solution of the problem is derived. The numerical calculations of the virus's elastic characteristics are conducted. This problem is the first step in the virus simulation with the help of the elasticity equations. It was established that more complicated statement of the problem in the frame of the anisotropic elastic problem should be used for the more adequate virus modeling.*

*Key Words: virus capsid PCV2, hollow sphere, acoustic environment, integral transformation, discontinuous solutions.*

### 1. Вступ

Для моделювання вірусів за допомогою математичних моделей використовувались наступні підходи: 1) підхід, що базується на гідродинамічній теорії [1]-[3]; 2) підхід, що використовує обчислювальні методи для розв'язання гідродинамічних задач та задач нелінійної теорії пружності [4]-[9]; 3) підхід, що базується на лінійних пружних моделях [8]-[11].

Зазначені роботи дозволили отримати багато важливих характеристик вірусу, але вони не дозволяють повністю розв'язати задачу для дослідження вірусу як тривимірного об'єкту.

У даній роботі для моделювання вірусу вперше застосована лінійна динамічна тривимірна теорія пружності. Це дозволило розглянути вірус як тривимірний об'єкт та отримати його важливі характеристики.

### 2. Постановка задачі та її розв'язання

Вірус PCV2 моделюється пружною порожньою сферою, що описується у сферичній системі координат співвідношеннями:  
 $R_1 < r < R_2, 0 < \theta < 2\pi, -\pi < \varphi < \pi$ . Функції  
переміщень  $u_r(r, \theta, \varphi, t), u_\theta(r, \theta, \varphi, t)$ ,

$u_\varphi(r, \theta, \varphi, t)$  задовольняють рівняння руху [12].  
Усередині та зовні сфери розташовані два  
різномірні акустичні середовища. Акустичні  
потенціали  $\Phi_i(r, \theta, \varphi, t)$  на внутрішній ( $i=1$ ) та  
зовнішній ( $i=2$ ) поверхнях задовольняють  
хвильові рівняння [13]

$$\Delta \Phi_i = \frac{1}{c_i^2} \frac{\partial^2 \Phi_i}{\partial t^2}, t > 0, i = 1, 2,$$

де  $c_i, i = 1, 2$  - хвильові швидкості. На внутрішній  
та зовнішній поверхнях сфери задано тиск  
оточуючих акустичних середовищ

$$\sigma_r(R_1 + 0, \theta, \varphi, t) = \rho_1 \frac{\partial \Phi_1}{\partial t}(R_1 - 0, \theta, \varphi, t), \quad (1)$$

$$\sigma_r(R_2 - 0, \theta, \varphi, t) = \rho_2 \frac{\partial(\Phi_2 + \Phi_0)}{\partial t}(R_2 + 0, \theta, \varphi, t)$$

$$\tau_{r\varphi}|_{r=R_i} = \tau_{r\theta}|_{r=R_i} = 0, \quad i = 1, 2 \quad (2)$$

та умови рівності швидкостей

$$\frac{\partial u_r}{\partial t}(R_1 + 0, \theta, \varphi, t) = \frac{\partial \Phi_1}{\partial r}(R_1 - 0, \theta, \varphi, t) \quad (3)$$

$$\frac{\partial u_r}{\partial t}(R_2 - 0, \theta, \varphi, t) = \frac{\partial(\Phi_2 + \Phi_0)}{\partial r}(R_2 + 0, \theta, \varphi, t)$$

Потрібно визначити поле переміщень та  
напружень на поверхнях та усередині сфери.

Розглядаються стаціонарні коливання.

До крайової задачі застосовується скінчене  
перетворення Фур'є за змінною  $\varphi$ .

Трансформанти функцій переміщень  
подаються у вигляді суперпозиції [14]  
 $u_n = u_n^1 + u_n^2, v_n = v_n^1 + v_n^2, w_n = w_n^1 + w_n^2$ , де верхній  
індекс 1 позначає механічні характеристики,  
неперервні на зовнішній поверхні сфери та  
розривні на внутрішній, а індекс 2 позначає  
механічні характеристики, неперервні на  
внутрішній поверхні сфери та розривні на  
зовнішній, тобто

$$\langle f_n \rangle|_{r=R_1} = \langle f_n^1 \rangle|_{r=R_1} + \langle f_n^2 \rangle|_{r=R_1} = \langle f_n^1 \rangle|_{r=R_1} = -f_n^1(R_1 + 0, \theta),$$

$$\langle f_n \rangle|_{r=R_2} = \langle f_n^1 \rangle|_{r=R_2} + \langle f_n^2 \rangle|_{r=R_2} = \langle f_n^2 \rangle|_{r=R_2} = f_n^2(R_2 - 0, \theta),$$

$$\text{де } \langle f_n \rangle|_{r=R_i} = f_n(R_i - 0, \theta) - f_n(R_i + 0, \theta),$$

$$f \in \{u, v, w, \sigma_r, \tau_{r\theta}, \tau_{r\varphi}\}.$$

Для акустичних потенціалів справедливі  
наступні формули

$$\langle \Phi_{1n} \rangle|_{r=R_1} = \Phi_{1n}(R_1 - 0, \theta),$$

$$\langle \Phi_{2n} \rangle|_{r=R_2} = -\Phi_{2n}(R_2 + 0, \theta) + \Phi_{0n}(R_2, \theta).$$

так як акустичні середовища розташовані лише  
усередині та зовні сфери.

До крайової задачі застосовується інтегральне  
перетворення Лежандра за змінною  $\theta$  [15].

У результаті отримуємо вирази для  
акустичних потенціалів

$$\Phi_{ink}(r) = R_i^2 \langle \Phi_{ink}(R_i) \rangle \left[ g_{ik}(R_i) - \frac{\partial}{\partial R_i} \Gamma_{ik}(r, R_i) \right], i = 1, 2$$

де

$$g_{ik}(R_i) = \frac{\partial}{\partial R_i} \Gamma_{ik}(R_i + (-1)^{i+1} 0, R_i) / \Gamma_{ik}(R_i + (-1)^{i+1} 0, R_i),$$

$$\Gamma_{i,k}(r, R_j) = \frac{\pi i}{2\sqrt{rR_j}} \begin{cases} I_\nu(rq_i) K_\nu(rq_i), r > R_j, \nu = k + 1/2 \\ I_\nu(rq_i) K_\nu(R_jq_i), r < R_j, k = 0, 1, 2, \dots \end{cases}$$

$$q_j^2 = -\frac{\omega_j^2}{c_j^2}, j = 1, 2.$$

Вирази для функцій переміщень та напружень  
отримано у явному вигляді через невідомі  
стрибки переміщень  $\langle u_{nk}^i(R_i) \rangle$  та напружень  
 $\langle \sigma_{rnk}^i(R_i) \rangle, i = 1, 2$ . Використовуючи умови (1), (3)  
можна виразити стрибки переміщень та  
напружень через стрибки акустичних потенціалів  
наступним чином

$$\langle \sigma_{rnk}^i(R_i) \rangle = (-1)^i \rho_i s_i \left( \Phi_{0nk}^i + \right. \\ \left. + R_i^2 \langle \Phi_{ink}(R_i) \rangle \left[ g_{ik}(R_i) - \frac{\partial}{\partial R_i} \Gamma_{ik}(r, R_i) \right] \right) \Big|_{r=R_i+(-1)^i 0},$$

$$\langle u_{rnk}^i(R_i) \rangle = (-1)^i \left\{ \frac{1}{s} \frac{d\Phi_{0nk}^i}{dr}(R_i + (-1)^i 0) + \right. \\ \left. + \frac{R_i^2}{s} \langle \Phi_{ink}(R_i) \rangle \left[ g_{ik}(R_i) - \frac{\partial^2}{\partial r \partial R_i} \Gamma_{ik}(r, R_i) \right] \right\} \Big|_{r=R_i+(-1)^i 0}, \\ i = 1, 2$$

Для визначення стрибків акустичних  
потенціалів  $\langle \Phi_{1nk}(R_1) \rangle, \langle \Phi_{2nk}(R_2) \rangle$   
використовується друга умова у (2).

В результаті отримано точний розв'язок крайової задачі для порожньої сфери, що оточена двома акустичними середовищами.

Числові розрахунки проведено для пружної сфери з параметрами  $E = 0.25 \cdot 10^9$  Па,  $\mu = 0.4$ ,  $R_1 = 10.4$  нм,  $R_2 = 13.2$  нм,  $\rho = 750$  а.о./нм<sup>3</sup>, частоти коливань сфери, внутрішнього та зовнішнього акустичних середовищ відповідно  $\omega_0 = \omega_1 = 0.1, \omega_2 = 0.2$ ,  $c_1 = 1400$  м/с,  $c_2 = 1560$  м/с. На внутрішній поверхні вірусу відсутня падаюча хвиля, а на зовнішній поверхні вона задана у наступному вигляді

$$\Phi_{02}(R_2, \theta, \varphi, t) = \begin{cases} e^{i(kR_2 - \omega_2 t)} / R_2 10^{-42}, & \frac{\pi}{4} \leq \theta \leq \frac{\pi}{2} \\ 0, & 0 < \theta < \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2} < \theta < \pi \end{cases} \quad [16]$$

$$k = \omega_2 / c_2.$$

На графіках (Рис. 1-2) представлені переміщення на внутрішній та зовнішній поверхнях вірусу.

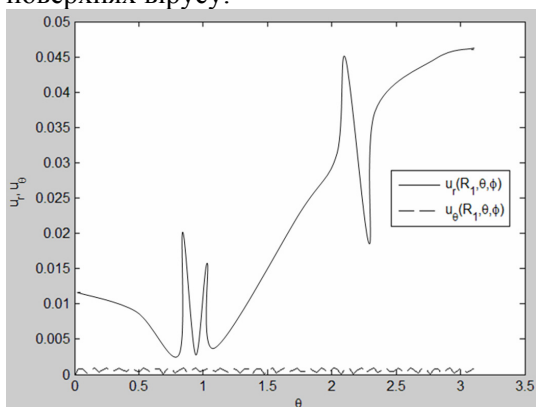


Рис. 1. Переміщення  $u_r(r, \theta, \varphi)$ ,  $u_\theta(r, \theta, \varphi)$  на внутрішній поверхні сфери ( $r=R_1$ )

### Список використаних джерел

1. *Markesteyjn A.* Concurrent multiscale modelling of atomistic and hydrodynamic processes in liquids / A. Markesteyjn, S. Karabasov, A. Scukins, D. Nerukh, V. Glotov, V. Goloviznin // *Phil. Trans. R. Soc.* – 2014. – Vol. 372. – P. 2021.
2. *Korotkin I.* Two-phase flow analogy as an effective boundary condition for modelling liquids at atomistic resolution / I. Korotkin, D. Nerukh, E. Tarasova, V. Farafonov, S. Karabasov // *Journal of Computational Science.* – 2016.
3. *Scukins A.* Multiscale molecular dynamics/hydrodynamics implementation of two dimensional “Mercedes Benz” water model / A. Scukins, D. Nerukh, E. Pavlov, S. Karabasov, A. Markesteyjn // *European Physical Journal.* – 2015.

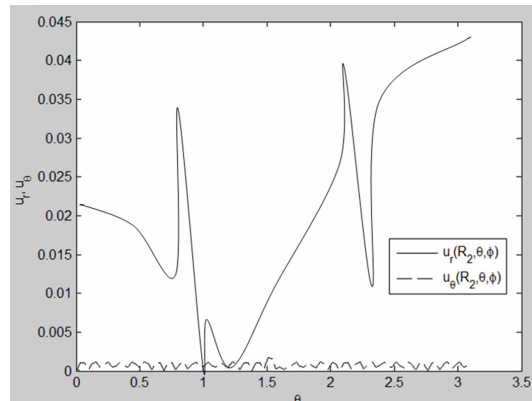


Рис. 2. Переміщення  $u_r(r, \theta, \varphi)$ ,  $u_\theta(r, \theta, \varphi)$  на зовнішній поверхні сфери ( $r=R_2$ )

З аналізу переміщень на поверхнях та усередненні сфери встановлено, що зміна кута  $\varphi$  слабо впливає на значення переміщень, тобто його зміною можна знехтувати та розглядати вісисиметричну задачу. Переміщення  $u_\varphi(r, \theta, \varphi)$  значно менше за переміщення  $u_r(r, \theta, \varphi)$ ,  $u_\theta(r, \theta, \varphi)$ .

### 3. Висновки

1. Побудована тривимірна модель для модулювання вірусу PCV2 з використанням рівнянь динамічної теорії пружності.
2. Встановлено деякі залежності механічних характеристик пружної моделі вірусу в залежності від заданого навантаження.
3. Отримані результати свідчать, що для більш реального моделювання вірусу потрібно враховувати його геометрію (ікосаедральність структури) та анізотропні властивості, для чого необхідно суттєво ускладнити існуючу модель.

Робота виконана у рамках держбюджетної теми 0115U003211.

### References

1. MARKESTEIJN, G. V., Karabasov, S., Scukins, A., Nerukh, D., Glotov, V. & Goloviznin, V. (2014) Concurrent multiscale modelling of atomistic and hydrodynamic processes in liquids. *Phil. Trans. R. Soc.* 372. p. 2021.
2. KOROTKIN, N. I., Nerukh, D., Tarasova, E., Farafonov, V. & Karabasov, S. (2016) Two-phase flow analogy as an effective boundary condition for modelling liquids at atomistic resolution. *Journal of Computational Science.*
3. SCUKINS, A., Nerukh, D., Pavlov, E., Karabasov, S. & Markesteyjn, A. (2015) Multiscale molecular dynamics/hydrodynamics implementation of two dimensional “Mercedes Benz” water model. *European Physical Journal.* 224, 12. p. 2217-

- Vol. 224, № 12. – P. 2217–2238.
4. Polles G. Mechanical and Assembly Units of Viral Capsids Identified via Quasi-Rigid Domain Decomposition / G. Polles, G. Indelicato, R. Potestio, P. Cermelli, R. Twarock, C. Micheletti // *PLoS Comput Biol.* – 2013. – Vol. 9, № 11.
  5. Roos, W.H. Squeezing Protein Shells: How Continuum Elastic Models, Molecular Dynamics Simulations, and Experiments Coalesce at the Nanoscale / W.H. Roos, M.M. Gibbons, A. Arkhipov, C. Uetrecht, N.R. Watts, P.T. Wingfield, A.C. Steven, A.J.R. Heck, K. Schulten, W.S. Klug, G.J.L. Wuite // *Biophysical Journal.* – 2010. – Vol. 99, № 4. – P. 1175–1181.
  6. Gibbons M.M. Nonlinear finite-element analysis of nanoindentation of viral capsids / M.M. Gibbons, W.S. Klug // *PhysRevE.* 75.031901. – 2007.
  7. Buenemann M. Mechanical limits of viral capsids / M. Buenemann, P. Lenz // *PNAS.* – 2007. – Vol. 104, № 24. – P. 9925–9930.
  8. Zink M. Mechanical Properties of the Icosahedral Shell of Southern Bean Mosaic Virus: A Molecular Dynamics Study / M. Zink, H. Grubmüller // *Biophysical Journal.* – 2009. – Vol. 96, № 4. – P. 1350–1363.
  9. May E.R. On the Morphology of Viral Capsids: Elastic Properties and Buckling Transitions / E.R. May, C.L. Brooks // *J. Phys. Chem.* – 2012. – Vol. 116. – P. 8604–8609.
  10. Buenemann M. Elastic properties and mechanical stability of chiral and filled viral capsids / M. Buenemann, P. Lenz // *PhysRevE.* 78.051924 PACS. – 2008.
  11. Zandi R. Mechanical properties of viral capsids / R. Zandi, D. Reguera // *Phys. Rev. E* 72, 021917.
  12. Nowacki W. *Theory of elasticity* / W. Nowacki. - Warszawa, 1970.
  13. Guz, A.N. *Theory of non-stationary aero-hydro-elasticity of shells* / A.N. Guz, V.D. Kubenko. - Naukova dumka: Kyiv, 1982.
  14. Vaisfel'd N. D. Nonstationary dynamic problems of elastic stress concentration near a spherical imperfection / N. D. Vaisfel'd, G. Ya. Popov // *Mechanics of Solids.* – 2002. – Vol. 37, № 3. – P. 77–88.
  15. Попов Г. Я. Концентрация упругих напряжений возле штампов, разрезов, тонких включений и подкреплений / Г. Я. Попов. – Москва: Наука, 1982. – 344 с.
  16. Исакович М. А. *Общая акустика* / М. А. Исакович. – Москва: Наука, 1973. – 502 с.
  4. POLLES, G., Indelicato, G., Potestio, R., Cermelli, P., Twarock, R. & Micheletti, C. (2013) Mechanical and Assembly Units of Viral Capsids Identified via Quasi-Rigid Domain Decomposition. *PLoS Comput Biol.* 9, 11.
  5. ROOS, W.H., Gibbons, M.M., Arkhipov, A., Uetrecht, C., Watts, N.R., Wingfield, P.T., Steven, A.C., Heck, A.J.R., Schulten, K., Klug, W.S. & Wuite, G.J.L. (2010) Squeezing Protein Shells: How Continuum Elastic Models, Molecular Dynamics Simulations, and Experiments Coalesce at the Nanoscale. *Biophysical Journal.* 99, 4, p. 1175–1181.
  6. GIBBONS, M.M. & Klug, W.S. (2007) Nonlinear finite-element analysis of nanoindentation of viral capsids. *PhysRevE.* 75.031901.
  7. BUENEMANN, M. & Lenz, P. (2007) Mechanical limits of viral capsids. *PNAS*, 104, 24, p. 9925–9930.
  8. ZINK, M. & Grubmüller, H. (2009) Mechanical Properties of the Icosahedral Shell of Southern Bean Mosaic Virus: A Molecular Dynamics Study. *Biophysical Journal*, 96, 4, p. 1350–1363.
  9. MAY, E.R. & Brooks, C.L. (2012) On the Morphology of Viral Capsids: Elastic Properties and Buckling Transitions. *J. Phys. Chem. B*, 116, p. 8604–8609.
  10. BUENEMANN, M. & Lenz, P. (2008) Elastic properties and mechanical stability of chiral and filled viral capsids. *PhysRevE.* 78.051924 PACS.
  11. ZANDI, R. & Reguera, D. (2005) Mechanical properties of viral capsids, *Phys. Rev. E* 72, 021917.
  12. NOWACKI, W. (1970) *Theory of elasticity*. Warszawa.
  13. GUZ, A.N. & Kubenko, V.D. (1982) *Theory of non-stationary aero-hydro-elasticity of shells*. Kyiv: Naukova dumka.
  14. VAISFEL'D, N. D. & Popov G. Ya. (2002) Non-stationary dynamic problems of elastic stress concentration near a spherical imperfection. *Mechanics of Solids.* 37, 3, p. 77–88.
  15. POPOV, G. Ya. (1982) *Koncentraciya Uprugih Napryazheniy Vozle Shtampov, Razrezov, Tonkih Vklucheniye i Podkrepleniye*. Moskva: Nauka.
  16. ISAKOVICH, M. A. (1973) *Obshchaya Akustika*. Moskva: Nauka.

Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія фізико-математичні науки, 2017, Спецвипуск.

УДК 539.3

Журавльова З.Ю., Нерух Д.О., Реут В.В., Козачков Д.Г., Вайсфельд Н.Д.

Про напружений стан вірусу PCV2

Укр.

Библ. 16 назв.

Вірус капсид PCV2 досліджується за допомогою побудови ідеалізованої моделі вірусу. Вона описується тривимірною динамічною задачею теорії пружності, що сформульована у сферичній системі координат для випадку стаціонарних коливань. Крайова задача розв'язується за допомогою методу інтегральних перетворень та методу розривних розв'язків. У результаті отриманий точний розв'язок задачі. Отримано числові розрахунки пружних характеристик вірусу.

Ключові слова: вірус капсид PCV2, порожня сфера, акустичне середовище, інтегральне перетворення, розривні розв'язки.

Z. Yu. Zhuravlova, D. A. Nerukh, V. V. Reut, D. G. Kozachkov, N. D. Vaysfel'd

On stress state of the PCV2 virus

English

Bibliography 16 title

The virus capsid PCV2 is investigated by the construction of the idealized virus model. It is described by the 3-D dynamical elasticity problem formulated in the spherical coordinate system for the steady-state oscillation process. The virus is modeled as the hollow elastic sphere, which is surrounded and fulfilled with the two different acoustic mediums. The integral Fourier and Legendre transformations were applied to the stated initial-boundary value problem. With the help of the discontinuous solutions' method the expressions for the displacements and acoustic potentials were derived in the exact form depending on the unknown jumps of the displacements and stresses. The conditions at the virus surfaces allowed to express the displacement and stress jumps via jumps of the acoustic potentials, which were obtained after solving of the two linear equations system. As a result, the exact solution of the problem is derived. The numerical calculations of the virus's elastic characteristics are conducted. This problem is the first step in the virus simulation with the help of the elasticity equations. It was established that more complicated statement of the problem in the frame of the anisotropic elastic problem should be used for the more adequate virus modeling.

Key Words: virus capsid PCV2, hollow sphere, acoustic environment, integral transformation, discontinuous solutions.