ISSN 2949-5083 (print)
ISSN 2949-5067 (online)

ПРОСВЕТ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ПРОСВЕЩЕНИЯ

Вестник

Государственного университета просвещения

Серия

Физика-математика

АКУСТИЧЕСКАЯ ЭМИССИЯ В ЗАКРЫТОЙ СОТОВОЙ СИСТЕМЕ, СОДЕРЖАЩЕЙ ВЛАГУ

ИЗЛУЧЕНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН ИЗ ПЛОСКОГО КАНАЛА, ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ РАСЧЁТЫ АДСОРБЦИИ И ПОДВИЖНОСТИ БИОМОЛЕКУЛ НА ПОВЕРХНОСТИ ГРАФЕНОВЫХ ПОДЛОЖЕК

2023/№ 4

ВЕСТНИК
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА ПРОСВЕЩЕНИЯ

ISSN 2949-5083 (print) 2023 / № 4 ISSN 2949-5067 (online)

серия

ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА

Рецензируемый научный журнал. Основан в 1998 г.

Журнал «Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика» включён в «Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, на соискание учёной степени доктора наук» Высшей аттестационной комиссии при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации (См.: Список журналов на сайте ВАК при Минобрнауки России) по следующим научным специальностям: 1.3.3. – Теоретическая физика (физико-математические науки); 1.3.8. – Физика конденсированного состояния (физико-математические науки).

The peer-reviewed journal was founded in 1998

«Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics» is included by the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation into "the List of reviewed academic journals and periodicals recommended for publishing in corresponding series basic research thesis results for a Ph.D. Candidate or Doctorate Degree" (See: the online List of journals at the site of the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation) on the following scientific specialities: 1.3.3. – Theoretical physics (physical-mathematical sciences); 1.3.8. – Physics of the condensed state (physical-mathematical sciences) (See: the online List of journals at the site of the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation).

ISSN 2949-5083 (print) 2023 / № 4 ISSN 2949-5067 (online)

series

PHYSICS AND MATHEMATICS

BULLETIN
OF FEDERAL STATE UNIVERSITY
OF EDUCATION

Учредитель журнала
«Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика»
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
Государственный университет просвещения
Выходит 4 раза в год

ISSN 2949-5083 (print)
ISSN 2949-5067 (online)

Рецензируемый научный журнал «Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика» публикует статьи по математическим проблемам термодинамики, кинетики и статистической физики; теории конденсированного состояния классических и квантовых, макроскопических и микроскопических систем; изучению различных состояний вещества и физических явлений в них; статистической физике и кинетической теории равновесных и неравновесных систем; теоретическому и экспериментальному исследованию физических свойств неупорядоченных неорганических систем; изучению экспериментального состояния конденсированных веществ и фазовых переходов в них. Журнал адресован ученым, докторантам, аспирантам и всем, интересующимся достижениями физико-математических наук.

Журнал «Вестник Государственного университета просвещения. Серия «Физика-математика» зарегистрирован в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия. Регистрационное свидетельство ПИ № ФС 77-73344.

Индекс серии «Физика-математика» по Объединенному каталогу «Пресса России» 40723

Журнал включён в базу данных Российского индекса научного цитирования (РИНЦ), имеет полнотекстовую сетевую версию в интернете на платформе Научной электронной библиотеки (www.elibrary.ru), с августа 2017 г. на платформе Научной электронной библиотеки «КиберЛенинка» (www.cyberleninka.ru), а также на сайтах Вестника Государственного университета просвещения (www.physmathmgou.ru, www.vestnik-mgou.ru).

Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. – 2023. – № 4. – 82 с.

Адрес редакции:
г. Москва, ул. Радио, д.10А, стр. 1, офис 98
тел.: (495) 780-09-42 (доб. 6101)
e-mail: info@vestnik-mgou.ru; сайты: www.physmathmgou.ru; www.vestnik-mgou.ru

Founder of journal
«Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics»
State University of Education

Issued 4 times a year

ISSN 2949-5083 (print)
ISSN 2949-5067 (online)

The reviewed scientific journal "Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics" publishes articles on mathematical problems of thermodynamics, kinetics and statistical physics; the theory of the condensed state of classical and quantum, macroscopic and microscopic systems; the study of various states of substance and physical phenomena in them; statistical physics and the kinetic theory of equilibrium and non-equilibrium systems; theoretical and experimental research of physical features of disordered inorganic systems; the study of the experimental state of condensed substances and phase transitions in them. The journal is addressed to scientists, doctoral students, PhD students and everyone interested in the achievements of physical and mathematical sciences.

The series "Physics and Mathematics" of the Bulletin of Federal State University of Education is registered in Federal service on supervision of legislation observance in sphere of mass communications and cultural heritage protection. The registration certificate ПИ № ФС 77 – 73344.

Index series «Physics and Mathematics» according to the union catalog «Press of Russia» 40723

The journal is included into the database of the Russian Science Citation Index, and its full texts are available through scientific electronic libraries "eLibrary" (www.elibrary.ru) and "CyberLeninka" (since August 2017; www.cyberleninka.ru), as well as on the journal's sites (www.physmathmgou.ru, www.vestnikmgou.ru).

Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics. – 2023. – № 4. – 82 p.

The Editorial Board address:
10A build. 1 Radio str., office 98, Moscow, Russia
Phone: (495) 780-09-42 (add. 6101)
e-mail: info@vestnik-mgou.ru; sites: www.physmathmgou.ru; www.vestnik-mgou.ru

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

CONTENTS

PHYSICS

ФИЗИКА

УДК 620.111.3
DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-6-18

АКУСТИЧЕСКАЯ ЭМИССИЯ В ЗАКРЫТОЙ СОТОВОЙ СИСТЕМЕ, СОДЕРЖАЩЕЙ ВЛАГУ

Асеев Е. М., Калашников Е. В.

Государственный университет просвещения
141014, Московская обл., г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24,
Российская Федерация

Аннотация
Цель: экспериментальное изучение фазового перехода «кристалл-жидкость» в интервале температур от – 10°С до +25°С в замкнутой системе со структурой типа «пчелиных сот», имеющей скопление воды.
Процедура и методы исследования. Используются методы акустической эмиссии, индуцированной изменением внешнего температурного поля. Под действием изменяющегося температурного поля внутри сотовой структуры происходит плавление кристаллов льда, вследствие чего излучаются дискретные ультразвуковые импульсы, которые фиксируются акустико-эмиссионной установкой для последующего анализа. Нагрев осуществляется двумя способами: (1) путём релаксации температуры охлаждённых образцов к значениям комнатной температуры; (2) охлаждённые образцы получают дополнительный, принудительный постоянный нагрев, тем самым увеличивается скорость роста температуры.
Результаты. Получены зависимости амплитуд и активности (количества импульсов акустической эмиссии в единицу времени) акустических сигналов от времени, а также частотное распределение зафиксированных ультразвуковых импульсов. Показано, что в результате принудительного нагрева наиболее чётко проявляются сигналы, свидетельствующие о фазовом переходе «лёд-вода» в сотах.
Практическая значимость. Проведённые эксперименты показывают, что метод акустической эмиссии при незначительных вариациях температурного поля позволяет обнаруживать дефект в виде наличия влаги в замкнутой сотовой структуре.

Ключевые слова: структура пчелиных сот, фазовый переход первого рода, дефекты в структурах, акустическая эмиссия

ACOUSTIC EMISSION IN A CLOSED HONEYCOMB SYSTEM CONTAINING MOISTURE

E. Aseev, E. Kalashnikov

Federal State University of Education
ulitsa Very Voloshinoi 24, Mytishchi 141014, Moscow Region, Russian Federation

Abstract.
Aim: experimental study of the "crystal-liquid" phase transition in the temperature range from –10°C до +25°C in a closed system with a "honeycomb" type structure with accumulation of water.
Methodology. Methods of acoustic emission induced by changes in the external temperature field are used. Under the influence of a changing temperature field, melting of ice crystals occurs inside the honeycomb structure, as a result of which discrete ultrasonic pulses are emitted, which are recorded by an acoustic emission installation for subsequent analysis. Heating is carried out in two ways: (1) by relaxing the temperature of cooled samples to room temperature values; (2) cooled samples receive additional, forced constant heating, thereby increasing the rate of temperature rise.
Results. The dependences of the amplitudes and activity (the number of acoustic emission pulses per unit time) of acoustic signals on time, as well as the frequency distribution of recorded ultrasonic pulses, were obtained. It is shown that as a result of forced heating, signals indicating an "ice-water" phase transition in the honeycombs most clearly appear.
Research implications. The conducted experiments show that the method of acoustic emission at insignificant variations of the temperature field allows to detect a defect in the form of moisture in a closed honeycomb structure.
Keywords: honeycomb structure, phase transition of the first kind, defects in structures, acoustic emission

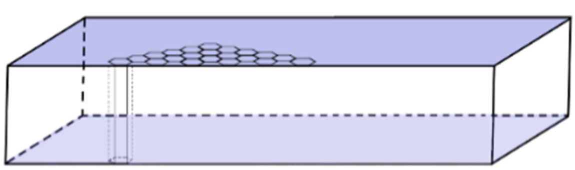
Введение

Задачи дефектности в современных материалах активно рассматриваются в современной литературе [2; 3; 5; 6; 7]. И методы акустической эмиссии находят широкое применение [4; 8; 9; 10]. Между тем спектр применения современных материалов очень широк [5; 7; 10], а что собой представляют некоторые дефекты и как они себя проявляют не совсем ясно.

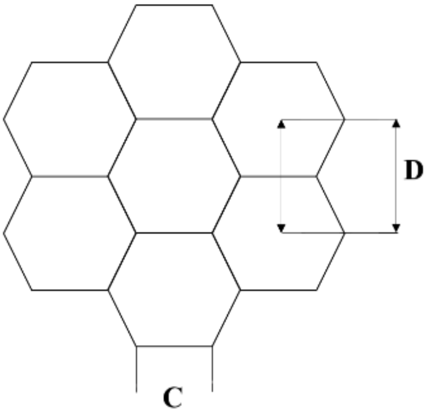
В предыдущих работах было установлено, что сигналы акустической эмиссии (их количество и поведение этих сигналов в зависимости от температуры и времени) позволяют идентифицировать дефекты в сотовой структуре типа «пчелиных сот» [1]. Другим проявлением дефектности в такой структуре может быть наличие влаги (воды). При отрицательных температурах вода в таких структурах существует в виде кристаллов льда. Это приводит к дополнительным напряжениям в сотах. При повышении температуры эти кристаллики начинают таять (плавиться). Это приводит к снятию напряжений в сотах и может оказаться причиной возникновения сигналов акустической эмиссии, которые могут быть зарегистрированы. Таким образом, задачей этой работы являются регистрация и анализ сигналов акустической эмиссии, возникающих в процессе таяния льда в замкнутой структуре типа «пчелиных сот».

1. Методика и схема эксперимента

Замкнутая структура представляет собой сэндвич-панель, сотовый заполнитель которой состоит из полимерной бумаги (известной как арамидная) и сопряжён по нормали с угольным композитом (рис. 1). Бумага в процессе производства пропитывается составом на основе спирторастворимых фенолформальдегидных смол. Соты представляют собой шестигранные призмы высотой $h = 28{,}5$ мм. Расстояние между центрами сот D = 5,2 мм, ширина грани равна C = 3 мм.



а)



б)

Рис. 1 /Fig. 1. Общий вид образца (а) и размеры сот (б) /
The general view of the sample (a) and the dimensions of the honeycomb (б).

Источник: составлено авторами

В ходе экспериментов рассматривалось два типа образцов. Первый (далее образец «*a*», малые размеры) имеет размеры 100×53×30 мм^3, а второй является большим по размерам (далее образец «*b*»): 225×95×30 мм^3.

После изготовления образов и проведения всего комплекса исследований на бездефектных образцах, в каждый из них было введено некоторое количество воды (в образец «*a*» –2 мл, в образец «*b*» – 4 мл). Далее оба образца (типа «*a*» и типа «*b*») помещались в морозильную камеру на 12 часов и охлаждались до температуры -10°С для замерзания воды внутри каждого.

Вид и схема экспериментальной установки представлены на рис. 2.

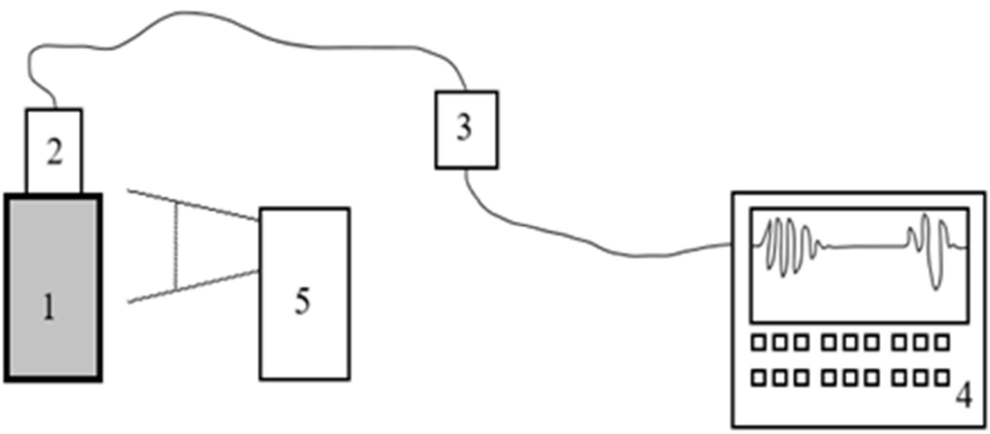


Рис. 2 / Fig. 2. Блок-схема экспериментальной установки:
1 – экспериментальный образец, 2 – пьезоэлектрический преобразователь акустической эмиссии (ПАЭ), 3 – предусилитель, 4 – комплекс акустико-эмиссионный измерительный, 5 – тепловизор / Block diagram of the experimental setup:
1 – experimental sample, 2 – piezoelectric acoustic emission converter (PAEC),
3 – preamplifier, 4 – acoustic emission measuring complex, 5 – thermal imager

Источник: составлено авторами

После изъятия из морозильной камеры образцы помещаются в экспериментальную установку при комнатной температуре (рис. 2). В результате нагревания кристаллы льда в сотах претерпевают фазовый переход первого рода и переходят в жидкое состояние. При этом переходе напряжения кристаллов льда внутри сот падают, и это является источником дискретной акустической эмиссии [1; 2; 3]. Сигналы АЭ поступают на вход преобразователя акустической эмиссии (ПАЭ) (2), откуда сигнал идёт на вход предусилителя (3) и далее – на блок аналого-цифрового преобразователя системы детектирования и обработки (4). Параллельно с контролем акустической эмиссии в режиме реального времени обеспечивается контроль температуры образца с помощью тепловизора (5).

В процессе эксперимента использовались: низкочастотные пьезоэлектрические преобразователи акустической эмиссии GT-205, масляная контактная смазка для увеличения коэффициента прохождения акустических сигналов на границе «исследуемый образец – ПАЭ», предусилители ALP-01, комплекс акустико-эмиссионный измерительный “A-Line PCI-1”, тепловизор InfReC R550Pro-D.

С помощью тепловизора производилось измерение температурного поля с частотой 1 кадр в 5 секунд.

Эксперимент производился в двух режимах нагрева:

(1) свободная релаксация температуры к её комнатным значениям ($\sim 25^{\circ}$C), т. е. образцы, охлаждённые до температуры -10°C, помещались в комнату, в которой поддерживалось постоянное значение температуры воздуха $+25^{\circ}$C;

(2) принудительный нагрев экспериментальных образцов до комнатных значений температуры ($\sim 25^{\circ}$C).

2. Результаты экспериментов

Результаты экспериментов можно представить в двух частях.

Первая (2.1) часть рассматривает свободную релаксацию температуры образцов от отрицательных значений температуры до значений комнатной температуры.

Вторая (2.2) часть учитывает влияние принудительного режима нагрева.

Все эксперименты проводились на двухканальной системе регистрации сигналов. Это позволило обеспечить одинаковые температурные условия одновременно для двух разных образцов.

2.1. Свободная релаксация температуры образцов

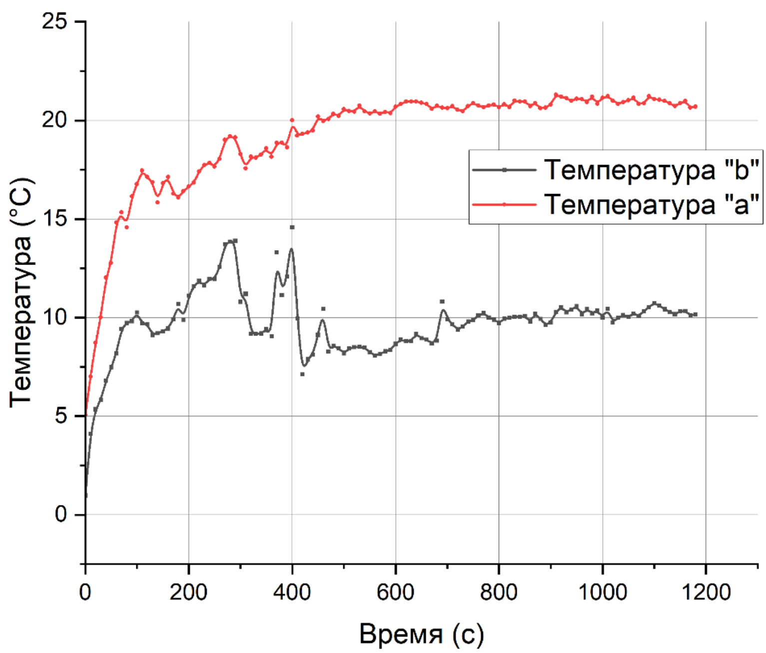


Рис. 3 / Fig. 3. Изменения температуры в режиме свободного нагрева / Temperature changes in the free heating mode**.**

Источник: составлено авторами

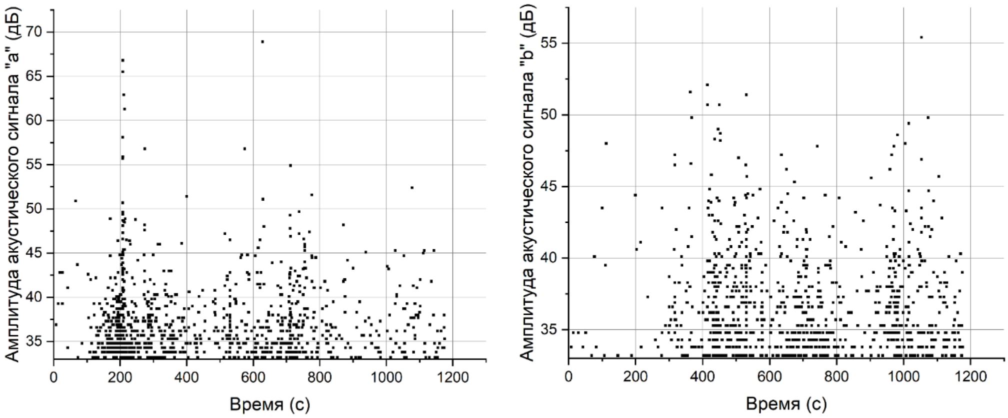


Рис. 4 / Fig. 4. Амплитуды пришедших на систему акустических импульсов с течением времени в условиях свободной релаксации к комнатным значениям температуры образцов («*a*» – малый образец, «*b*» – большой образец) / Amplitudes of acoustic pulses arriving at the system with time under conditions of free relaxation to room temperature values of samples («*a*» – small sample, «*b*» – large sample)

Источник: составлено авторами

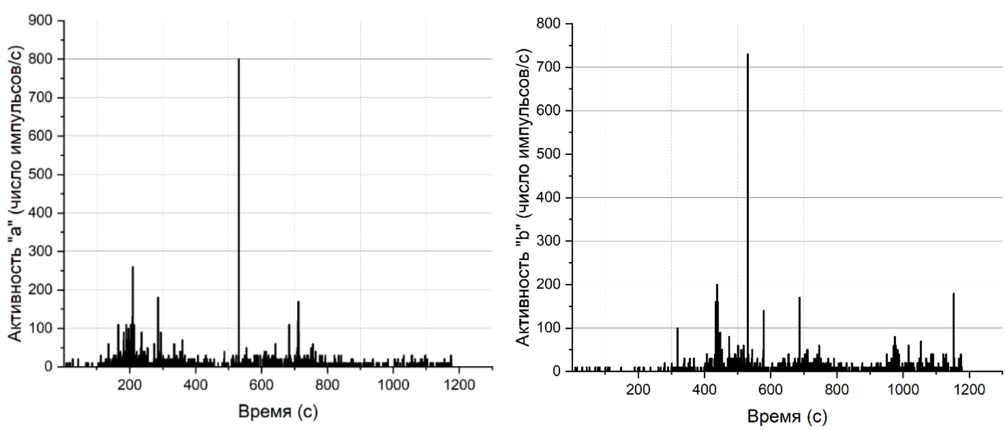
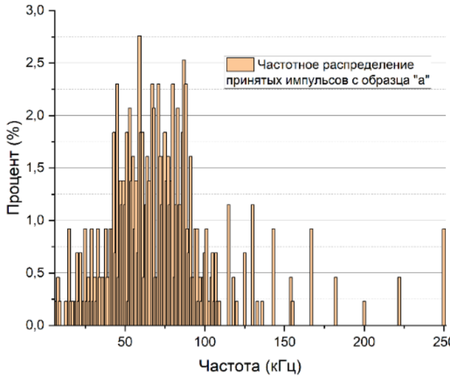


Рис. 5 / Fig. 5. Активность сигналов акустической эмиссии в условиях свободной релаксации к комнатным значениям температуры образцов («*a*» – малый образец, «*b*» – большой образец) / Activity of acoustic emission signals under conditions of free relaxation to room temperature values of samples («*a*» – small sample, «*b*» – large sample)

Источник: составлено авторами



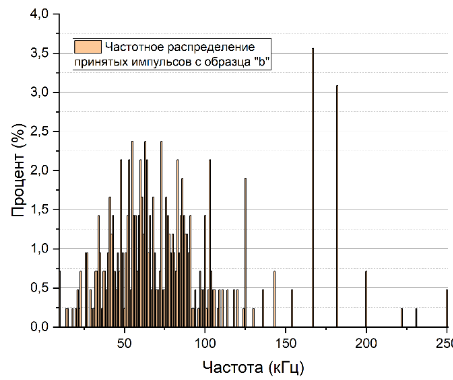


Рис. 6 / Fig. 6. Частотные распределения сигналов акустической эмиссии в условиях свободной релаксации к комнатным значениям температуры образцов («*a*» – малый образец, «*b*» – большой образец) / Frequency distributions of acoustic emission signals under conditions of free relaxation to room temperature values of samples («*a*» – small sample, «*b*» – large sample).

Источник: составлено авторами

Свободная релаксация температуры образцов представлена на рис. 3–6. Для малого образца основное скопление пришедших импульсов приходится на интервал времени 100÷400 с, а для большого образца скопление пришедших импульсов оказывается равномерно распределённым с 300 секунды вплоть до окончания эксперимента (1200 с). Этот интервал приходится на переход температуры в «насыщение» (рис. 3), когда значения температуры образца остаются практически неизменными. Малый образец «*a*» начинает активно излучать раньше большого образца «*b*».

Амплитуды пришедших на систему акустических импульсов с течением времени (рис. 4) в условиях свободной релаксации температуры к комнатным значениям проявляют несколько «кучностей», которые, в общем, не коррелируют с всплесками на зависимостях изменений температуры образцов (рис. 3).

Активность сигналов (рис. 5) акустической эмиссии в условиях свободной релаксации к комнатным значениям температуры больших и малых образцов носит случайный характер.

Частотные распределения сигналов. Резонансная частота использовавшихся преобразователей GT-205 равна 55 кГц, при этом они демпфированы так, чтобы увеличить рабочую полосу частот (примерно от 40 до 120 кГц). На частотных распределениях сигналов для малых «*a*» и больших «*b*» образцов выявляется максимума амплитуд сигналов вблизи частоты 75 кГц (рис. 6). Это предполагает, что в процессе таяния льда в сложной замкнутой структуре типа «пчелиных сот» наиболее эффективно излучение ультразвуковых колебаний приходится на волны с частотами близкими 75 кГц. При этом на расположение максимума частотного распределения (рис. 6) не влияет амплитудно-частотная характеристика (АЧХ) использовавшихся пьезоэлектрических преобразователей, и нет зависимости от размера экспериментального образца. Кроме того, максимальная амплитуда импульсов на малом образце, «*a*» значительно превышает амплитуду импульсов на большом образце «*b*».

2.2. Принудительный нагрев образцов

Этот процесс характеризуется постоянным во времени потоком тепла, сообщаемым образцам. Этому процессу соответствуют рис. 7–10.

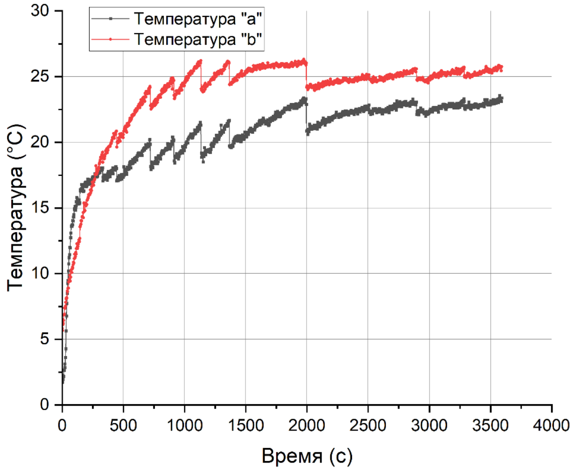


Рис. 7 / Fig. 7. Изменения температуры образцов в режиме принудительного нагрева / Temperature changes of samples in forced heating mode

Источник: составлено авторами

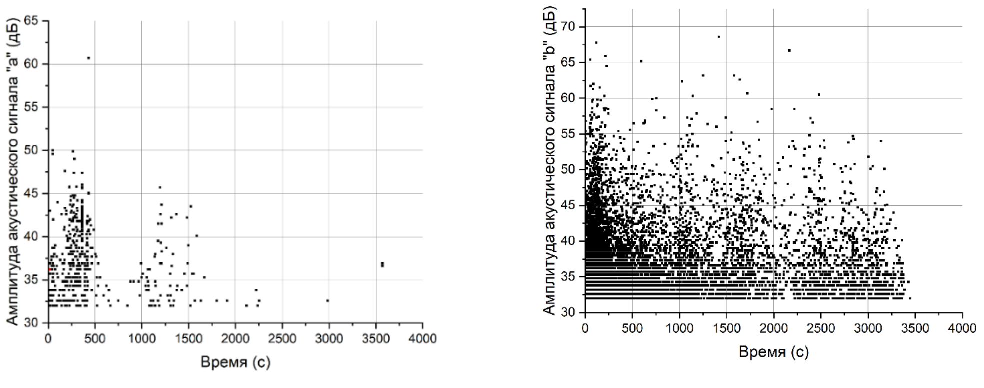


Рис. 8 / Fig. 8. Амплитуды пришедших на систему акустических импульсов с течением времени в условиях ускоренного нагрева образцов («*a*» – малый образец, «*b*» – большой образец) / Amplitudes of acoustic pulses coming to the system over time under conditions of accelerated heating of samples («*a*» – small sample, «*b*» – large sample)

Источник: составлено авторами

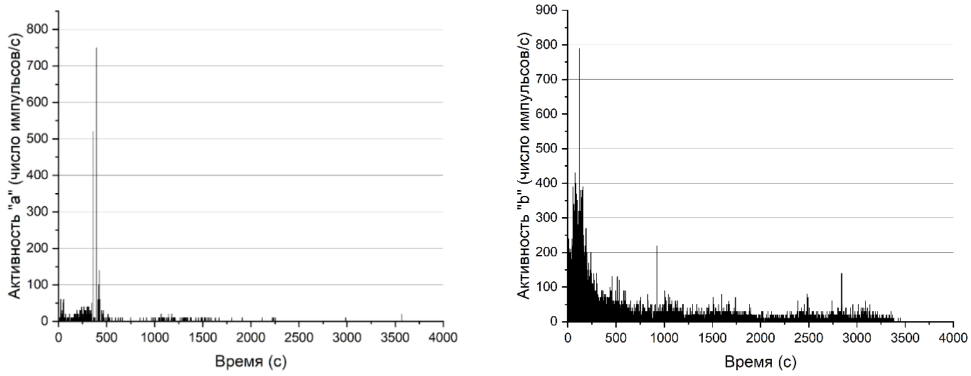


Рис. 9 / Fig. 9. Активность сигналов акустической эмиссии в условиях ускоренного нагрева образцов («*a*» – малый образец, «*b*» – большой образец) / Activity of acoustic emission signals under conditions of accelerated heating of samples («*a*» – small sample, «*b*» – large sample)

Источник: составлено авторами

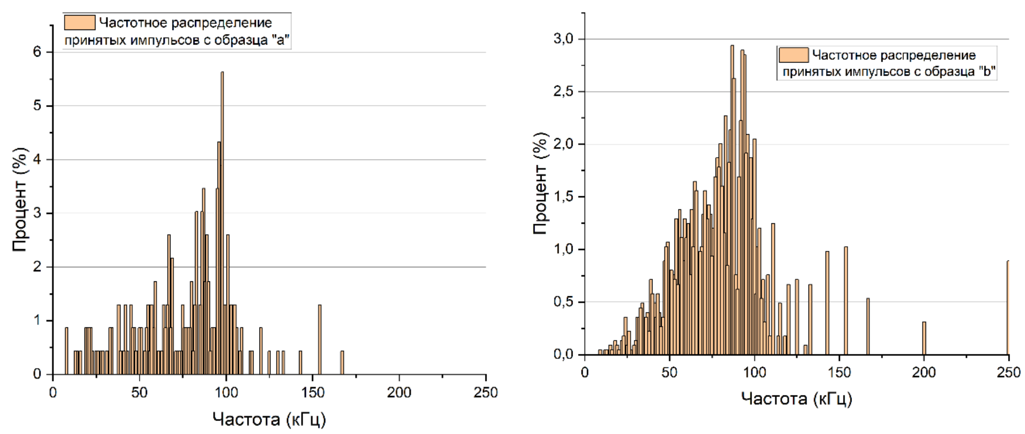


Рис. 10 / Fig. 10. Частотные распределения сигналов акустической эмиссии в условиях ускоренного нагрева образцов («*a*» – малый образец, «*b*» – большой образец) / Frequency distributions of acoustic emission signals under conditions of accelerated heating of samples («*a*» – small sample, «*b*» – large sample)

Источник: составлено авторами

Частотное распределение сигналов для принудительного нагрева также обнаруживает максимум, но соответствующий частоте 95 кГц (рис. 10).

Следовательно, на частоту излучения импульсов акустической эмиссии, инициированной таянием льда внутри сотовой структуры, влияет скорость изменения температурного поля, а именно скорость нагрева.

Активность сигналов акустической эмиссии в условиях ускоренного нагрева образцов (рис. 9) теперь характеризуется чётким проявлением максимальных значений.

Амплитуды пришедших на систему акустических импульсов (рис. 8) с течением времени в условиях ускоренного нагрева образцов характеризуется большим количеством импульсов.

Изменения температуры образцов со временем (рис. 7) приобретают пилообразный характер. Такой пилообразный характер проявляется как для малых, так и для больших образцов.

3. Обсуждение результатов

Одним из важных результатов работы является выявление возможности обнаруживать дефекты сотовой структуры в виде влаги, содержащейся в сотах при вариациях температуры в интервале от -10^0C до $+25^0$C. Эксперименты показывают, что в этом температурном интервале дефекты замкнутой сотовой структуры в виде воды, заполняющей соты, хорошо проявляются.

В заданном интервале температур, влага в виде льда претерпевает фазовый переход «твёрдое тело – жидкость» при нормальном давлении в тройной точке при 0^0C. И в этом случае в окрестности этой точки можно было ожидать определённой активности в акустической эмиссии в том виде, как это наблюдали при таянии льда [5]. Однако вся акустическая активность при вариациях температуры во времени начала проявляться при гораздо более высоких температурах, рис. 3 и рис. 7. Более того, при свободной релаксации температуры образцов (рис. 7) температура большого образца так и не достигла комнатных значений температуры, хотя и вышла в режим «насыщения», когда температура образца установилась и практически не менялась. Такая ситуация предполагает, что кристаллы льда в сотах остаются ещё неопределённо долгое время и температура, которая при этом измеряется на внешней части замкнутой сотовой структуры, не соответствует равновесной температуре превращения «кристалл льда – вода».

Совсем другая ситуация возникает при принудительном нагревании образцов. В этом случае в образцы всегда подаётся постоянно одно и то же количество теплоты. Картина изменения температуры со временем (рис. 7) и все остальные характеристики процесса, происходящего в сотах замкнутой системы (рис. 7–10), полностью отличаются от аналогичных характеристик для свободной релаксации температуры образцов (рис. 3–6). Зависимость температуры от времени приобретает пилообразный характер изменения как на больших образцах, так и на малых образцах. Такая пилообразность, по-видимому, связана с тем, что фазовый переход «кристалл – жидкость», во-первых, носит локальный характер. Это значит, что в таком переходе участвует определённое количество вещества в соте, а не все кристаллики льда в соте сразу. А во-вторых, пока всё кристаллическое состояние в соте не перейдёт в жидкое состояние, в других, соседних, сотах переход кристаллов в жидкое состояние не завершится.

Статья поступила в редакцию 16.10.2023 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Асеев Е. М., Калашников Е. В. Влияние дефектности сотовой структуры в системе «сотовая матрица – композит» на акустическую эмиссию в изменяющемся температурном поле // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2022. № 2. С. 17–27. DOI:10.18384/2310-7251-2022-2-17-27.
2. Бехер С. А., Бобров А. Л. Основы неразрушающего контроля методом акустической эмиссии. Новосибирск: Изд-во СГУПСа, 2013. 145 с.
3. Буйло С. И. Физико-механические, статистические и химические аспекты акустико-эмиссионной диагностики. Таганрог: Издательство Южного федерального университета, 2017. 184 с.
4. Кузнецов Д. М., Смирнов А. Н., Сыроешкин А. В. Акустическая эмиссия при фазовых превращениях в водной среде // Российский химический журнал. 2008. Т. 52. № 1. С. 114–121.
5. Acoustic Emission / Aggelis D. G., Sause M. G. R., Packo P., Pullin R., Grigg S., Kek T., Lai Y.-K. // Structural Health Monitoring Damage Detection Systems for Aerospace / eds. M. G. R. Sause, E. Jasiūnienė. Cham, Switzerland: Springer Aerospace Technology, 2022. P. 175–218. DOI: 10.1007/978-3-030-72192-3_7.
6. Dislocation unpinning model of acoustic emission from alkali halide crystals / Chandra B. P., Gour A. S., Chandra V. K., Patil Y. // Pramana. Journal of Physics. 2004. Vol. 62. Iss. 6. P. 1281–1292. DOI: 10.1007/BF02704440.
7. Defect Types / Faisal N., Cora Ö. N., Bekci M. L., Śliwa R. E., Sternberg Y., Pant S., Degenhardt R., Prathuru A. // Structural Health Monitoring Damage Detection Systems for Aerospace / eds. M. G. R. Sause, E. Jasiūnienė. Cham, Switzerland: Springer Aerospace Technology, 2022. P. 15–42. DOI: 10.1007/978-3-030-72192-3_3.
8. Kuba M. M., Van Aken D. C. Analysis of acoustic emission during the melting of embedded Indium particles in an aluminum matrix: a study of plastic strain accommodation during phase transformation (presented at Symposium: Atomistic Effects in Migrating Interphase Interfaces: Recent Progress and Future Study. 2012) // Metallurgical and Materials Transactions A. 2013. Vol. 44. Iss. 8. P. 3444–3455. DOI: 10.1007/s11661-012-1468-y.
9. Laschimkea R., Burgera M., Vallen H. Acoustic emission analysis and experiments with physical model systems reveal a peculiar nature of the xylem tension // Journal of Plant Physiology. 2006. Vol. 163. Iss. 10. P. 996–1007. DOI: 10.1016/j.jplph.2006.05.004.
10. Ultrasonic Methods / Samaitis V., Jasiūniené E., Packo P., Smagulova D. // Structural Health Monitoring Damage Detection Systems for Aerospace / eds. M. G. R. Sause, E. Jasiūnienė. Cham, Switzerland: Springer Aerospace Technology, 2022. P. 87–132. DOI: 10.1007/978-3-030-72192-3_5.

REFERENCES

1. Aseev E. M., Kalashnikov E. V. [The effect of defects on the structure in the form of honeycombs in the “honeycomb – composite matrix” system on acoustic emission in a

changing temperature field]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-matematika* [Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics], 2022, no. 2, pp. 17–27. DOI: 10.18384/2310-7251-2022-2-17-27.
2. Bekher S. A., Bobrov A. L. *Osnovy nerazrushayushchego kontrolya metodom akusticheskoy emissii* [Fundamentals of non-destructive testing using the acoustic emission method]. Novosibirsk, Siberian Transport University Publ., 2013. 145 p.
3. Buylo S. I. *Fiziko-mekhanicheskiye, statisticheskiye i khimicheskiye aspekty akustiko-emissionnoy diagnostiki* [Physico-mechanical, statistical and chemical aspects of acoustic emission diagnostics]. Taganrog, Southern Federal University Publ., 2017. 184 p.
4. Kuznetsov D. M., Smirnov A. N., Syroyeshkin A. V. [Acoustic emission during phase transformations in an aqueous environment]. In: *Rossiyskiy khimicheskiy zhurnal* [Russian Journal of General Chemistry], 2008, vol. 52, no. 1, pp. 114–121.
5. Aggelis D. G., Sause M. G. R., Packo P., Pullin R., Grigg S., Kek T., Lai Y.-K. Acoustic Emission. In: Sause M. G. R., Jasiūnienė E., eds. *Structural Health Monitoring Damage Detection Systems for Aerospace*. Cham, Switzerland, Springer Aerospace Technology, 2022, pp. 175–218. DOI: 10.1007/978-3-030-72192-3_7.
6. Chandra B. P., Gour A. S., Chandra V. K., Patil Y. Dislocation unpinning model of acoustic emission from alkali halide crystals. In: *Pramana. Journal of Physics*, 2004, vol. 62, iss. 6, pp. 1281–1292. DOI: 10.1007/BF02704440.
7. Faisal N., Cora Ö. N., Bekci M. L., Śliwa R. E., Sternberg Y., Pant S., Degenhardt R., Prathuru A. Defect Types. In: Sause M. G. R., Jasiūnienė E., eds. *Structural Health Monitoring Damage Detection Systems for Aerospace*. Cham, Switzerland, Springer Aerospace Technology, 2022, pp. 15–42. DOI: 10.1007/978-3-030-72192-3_3.
8. Kuba M. M., Van Aken D. C. Analysis of acoustic emission during the melting of embedded Indium particles in an aluminum matrix: a study of plastic strain accommodation during phase transformation (presented at Symposium: Atomistic Effects in Migrating Interphase Interfaces: Recent Progress and Future Study. 2012). In: *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2013, vol. 44, iss. 8, pp. 3444–3455. DOI: 10.1007/s11661-012-1468-y.
9. Laschimkea R., Burgera M., Vallen H. Acoustic emission analysis and experiments with physical model systems reveal a peculiar nature of the xylem tension. In: *Journal of Plant Physiology*, 2006, vol. 163, iss. 10, pp. 996–1007. DOI: 10.1016/j.jplph.2006.05.004.
10. Samaitis V., Jasiūniené E., Packo P., Smagulova D. Ultrasonic Methods. In: Sause M. G. R., Jasiūnienė E., eds. *Structural Health Monitoring Damage Detection Systems for Aerospace*. Cham, Switzerland, Springer Aerospace Technology, 2022, pp. 87–132. DOI: 10.1007/978-3-030-72192-3_5.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Асеев Евгений Михайлович – аспирант кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения;
e-mail: aseevgenij@yandex.ru

Калашников Евгений Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры вычислительной математики и информационных технологий Государственного университета просвещения;
e-mail: ekevkalashnikov1@gmail.com

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Evgeniy M. Aseev – Postgraduate Student, Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education;
e-mail: aseevgenij@yandex.ru

Evgeniy V. Kalashnikov – Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., Department of Computational Mathematics and Information Technology, Federal State University of Education;
e-mail: ekevkalashnikov1@gmail.com

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Асеев Е. М., Калашников Е. В. Акустическая эмиссия в закрытой сотовой системе, содержащей влагу // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2023. № 4. С. 6–18.
DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-6-18

FOR CITATION

Aseev E. M., Kalashnikov E. V. Acoustic emission in a closed honeycomb system containing moisture. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2023, no. 4, pp. 6–18.
DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-6-18

УДК: 534.26
DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-19-33

ИЗЛУЧЕНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН ИЗ ПЛОСКОГО КАНАЛА, ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ

Жаров В. А.

Центральный аэрогидродинамический институт
имени профессора Н. Е. Жуковского
140180, Московская область, г. Жуковский, ул. Жуковского, д. 1,
Российская Федерация

Аннотация
Цель: рассмотреть процесс излучения звуковой волны (главная мода) из полубесконечного канала без фланца, когда воздух внутри и вне канала покоится; развить процедуру приближенного получения решения, которая позволяет получить коэффициенты отражения и трансформации волны основной моды на срезе канала, а также диаграмму направленности и пространственное распределение акустического давления вне канала; сравнить с точным аналитическим решением.
Процедура и методы. Решение задачи выражено через собственные функции задачи непрерывного и дискретного спектра. В качестве условий замыкания использованы условия непрерывности решения на срезе канала.
Результаты. Определены приближенные характеристики излучения звука из канала без фланцев, минуя процедуру Винера – Хопфа.
Теоретическая и/или практическая значимость. Предложенная процедура упрощает получение решения по сравнению с методом Винера – Хопфа, что в случае движущегося в канале газа позволяет связать процесс генерации звука с характеристиками пограничного слоя на стенках канала.
Ключевые слова: полубесконечный канал, невязкий совершенный газ, излучение звука из канала

RADIATION OF ACOUSTIC WAVES FROM A FLAT CHANNEL, APPROXIMATE SOLUTION

V. Zharov

Central Aerohydrodynamic Institute named after N. E. Zhukovsky
ulitsa Zhukovskogo 1, Zhukovsky 140180, Moscow region, Russian Federation

Abstract
Aim: to consider the process of emitting a sound wave (main mode) from a semi-infinite channel without a flange when the air inside and outside the channel is at rest, to develop a procedure for approximating the solution, which allows us to obtain the reflection and transformation

coefficients of the main mode wave on the channel slice, as well as a directional pattern and spatial distribution of acoustic pressure outside the channel, and compare it with an accurate analytical solution.
Methodology. The solution of the problem is expressed in terms of the eigenfunctions of the continuous and discrete spectrum problem. The conditions of continuity of the solution on the channel slice are used as closure conditions.
Results. Approximate characteristics of sound emission from a channel without flanges are determined, bypassing the Wiener – Hopf procedure.
Research implications. The proposed procedure simplifies obtaining a solution compared to the Wiener – Hopf method, which, in the case of gas moving in the channel, makes it possible to link the sound generation process with the characteristics of the boundary layer on the channel walls.
Keywords: semi-infinite channel, inviscid perfect gas, sound emission from the channel

Введение

Процесс излучения звука из канала относится к сложным волновым явлениям, связанным с дифракцией акустических волн на срезе канала. Имеется строгая математическая теория (метод Винера – Хопфа [1; 2]), адекватно описывающая излучение звука, распространяющегося в канале, когда газ внутри и вне канала покоится, которая позволяет получить поле акустического давления во всей области распространения звука и определить звуковое давление не только в волновой зоне, но и на срезе канала [3]. Эта теория существенно усложняется, когда газ внутри канала и снаружи движется, и эти скорости различны [4; 5]. Исследования акустического поля в рассмотренной ситуации изучаются и экспериментально [6].

Разрабатываемые в настоящее время численные методы [7] позволяют решить эту задачу, но требуют большого машинного ресурса. Кроме того, определённые трудности в интерпретации этого явления возникают, когда скорость движения газа внутри канала и вне его является дозвуковой [8].

В связи с этим, на наш взгляд, представляет интерес переформулирование известных результатов, относящихся к излучению звука из канала на основе собственных функций канала и вне его, дающее более физический взгляд на эти явления благодаря аналогии между волнами неустойчивости в пограничном слое и акустическими волнами в канале, струе и внешнем к струе пространстве. В теории устойчивости пограничного слоя известно [9], что набор волн (волны Толлмина – Шлихтинга [10]) состоит из дискретного и непрерывного спектров волн. Соответственно, добавляя к дискретному набору акустических волн в канале и струе волны непрерывного спектра, на этом языке можно довольно просто интерпретировать ряд известных результатов. Ниже представлена реализация этих идей в случае покоящегося воздуха внутри канала и снаружи. Предлагается приближенное решение задачи, которое пригодно, по крайней мере, для $\omega/c \in [0,3]$, ω– частота, c– скорость звука в газе.

Результаты исследования

1. Вывод интегрального уравнения (см. [2; 11]). Если φ в некоторой области R удовлетворяет уравнению

$$\varphi_{xx} + \varphi_{yy} + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \varphi = 0,$$

то

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi}\int\limits_{S_0}\left\{G(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)\frac{\partial\varphi(\mathbf{r}_0)}{\partial n_0} - \frac{\partial G(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)}{\partial n_0}\varphi(\mathbf{r}_0)\right\}dS_0,$$

где точка $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0)$ лежит на границе S_0 области R, а интегрирование проводится по этой границе [2]. Здесь $G(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)$ – функция Грина. Производная $\partial/\partial n_0$ берётся по внешней нормали к S_0 в точке (x_0, y_0). Кроме того, на границе реальных тел (условие непротекания) $\frac{\partial\varphi(\mathbf{r}_0)}{\partial n_0} = 0$. Далее полагается c=1.

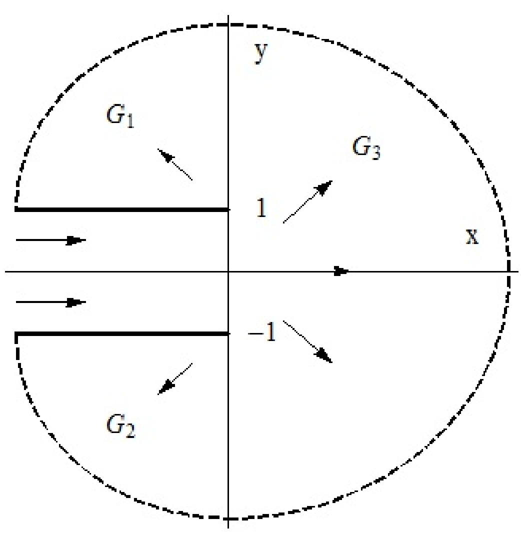


Рис. 1 / Fig. 1. Схема расположения областей при излучении звука из канала / Diagram of the location of areas when sound is emitted from the channel

Источник: составлено автором

Пусть слева внутри канала набегает волна $e^{-i\omega t+i\alpha_{in}x}$. Внутрь канала бежит отражённая волна $\left(R_{00}e^{-i\alpha_0 x}+\sum_{n=1}^{\infty}R_{0n}\psi_i(y)e^{-i\alpha_n x}\right)Exp[-i\omega t]$ [1], $R_{0,n}$, $n=0,1,2,\ldots$, – коэффициенты отражения и трансформации набегающей волны в отражённую и систему гармоник [1]. Схема областей задачи изображена на рис. 1. Выберем функцию Грина в областях 1, 2 и 3 так, чтобы $\partial G(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)/\partial n_0=0$. Пунктиром обозначена бесконечно удалённая поверхность. Тогда 1

$$\varphi(\mathbf{r})=\frac{1}{4\pi}\int_{S_0}\left\{G(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)\frac{\partial\varphi(\mathbf{r}_0)}{\partial n_0}\right\}dS_0 .$$

Учитывая знак при определении производной по нормали, получим:
для области 1

$$\varphi(x,y)=-\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{0}G_1(x,y;x_0,1)\frac{\partial\varphi}{\partial y_0}dx_0+\frac{1}{4\pi}\int_{1}^{\infty}G_1(x,y;0,y_0)\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}dy_0 ,\qquad (1)$$

для области 2

$$\varphi(x,y)=\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{0}G_2(x,y;x_0,-1)\frac{\partial\varphi}{\partial y_0}dx_0+\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{-1}G_2(x,y;0,y_0)\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}dy_0 ,\qquad (2)$$

для области 3

$$\varphi(x,y)=-\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}G_3(x,y;0,y_0)\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}dy_0 .\qquad (3)$$

Функция Грина должна представлять уходящую на бесконечности волну. Поэтому удобно её строить (методом отображений) из функции Ганкеля $\mathrm{H}_0^{(1)}(\omega R)$, $R=\sqrt{x^2+y^2}$:
(область 3)

$$G_3(x,y;x_0,y_0)=\left(\mathrm{H}_0^{(1)}(\omega R)+\mathrm{H}_0^{(1)}(\omega R')\right),$$
$$R=\sqrt{(x-x_0)^2+(y-y_0)^2},\ R'=\sqrt{(x+x_0)^2+(y-y_0)^2};$$

(область 1)

$$G_1(x,y;x_0,y_0)=\left(\mathrm{H}_0^{(1)}(\omega R)+\mathrm{H}_0^{(1)}(\omega R_1)+\mathrm{H}_0^{(1)}(\omega R_2)+\mathrm{H}_0^{(1)}(\omega R_3)\right),$$
$$R=\sqrt{(x-x_0)^2+(y-y_0+1)^2},\ R_1=\sqrt{(x+x_0)^2+(y-y_0+1)^2},$$
$$R_2=\sqrt{(x-x_0)^2+(y+y_0-1)^2},\ R_3=\sqrt{(x+x_0)^2+(y+y_0-1)^2};$$

(область 2)

$$G_2\left(x,y;x_0,y_0\right)=\left(\mathrm{H}_0^{(1)}\left(\omega R\right)-\mathrm{H}_0^{(1)}\left(\omega R_1\right)+\mathrm{H}_0^{(1)}\left(\omega R_2\right)-\mathrm{H}_0^{(1)}\left(\omega R_3\right)\right),$$
$$R=\sqrt{\left(x-x_0\right)^2+\left(y-y_0-1\right)^2},\ R_1=\sqrt{\left(x+x_0\right)^2+\left(y-y_0-1\right)^2},$$
$$R_2=\sqrt{\left(x-x_0\right)^2+\left(y+y_0+1\right)^2},R_3=\sqrt{\left(x+x_0\right)^2+\left(y+y_0+1\right)^2};$$

Имея уравнения (1), (2) и (3) и предполагая, что нормальная производная искомой функции φ на твёрдой границе равна нулю, можно получить уравнения для подынтегральной функции $\partial\varphi/\partial x_0$.

Из

$$\varphi(x,y)=\frac{1}{4\pi}\int_1^\infty G_1\left(x,y;0,y_0\right)\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}dy_0 \text{ и } \varphi(x,y)=-\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^\infty G_3\left(x,y;0,y_0\right)\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}dy_0$$

при $y\geq 1$, учитывая граничные условия на стенке и непрерывность на линии $x=0$, из уравнений (1) и (3) получим

$$\begin{gathered}\frac{1}{4\pi}\int_1^\infty G_1\left(0,y;0,y_0\right)\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}dy_0=-\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^\infty G_3\left(0,y;0,y_0\right)\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}dy_0=\\=-\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{-1}G_3\left(0,y;0,y_0\right)\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}dy_0-\frac{1}{4\pi}\int_{-1}^{1}G_3\left(0,y;0,y_0\right)\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}dy_0-\frac{1}{4\pi}\int_1^\infty G_3\left(0,y;0,y_0\right)\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}dy_0.\end{gathered}\tag{4}$$

Аналогично при $y\geq -1$ из уравнений (2) и (3) получим

$$\begin{gathered}\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{-1}G_2\left(0,y;0,y_0\right)\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}dy_0=-\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^\infty G_3\left(0,y;0,y_0\right)\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}dy_0=\\=-\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{-1}G_3\left(0,y;0,y_0\right)\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}dy_0-\frac{1}{4\pi}\int_{-1}^{1}G_3\left(0,y;0,y_0\right)\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}dy_0-\frac{1}{4\pi}\int_1^\infty G_3\left(0,y;0,y_0\right)\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}dy_0.\end{gathered}\tag{5}$$

При $y\geq 1$ вид решения известен (акустические моды в плоском канале [2]):

$$\begin{gathered}\varphi[x,y]=\left(e^{i\alpha_0x}+R_{00}e^{-i\alpha_0x}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}+\sum_{n=1}^\infty R_{0n}\psi_{in}^{(n)}(y)e^{-i\alpha_nx},\quad \varphi[0,y]=1+R_{00}+\sum_{n=1}^\infty R_{0n}\psi_{in}^{(n)}(y),\quad y\in[-1,1].\\ \alpha_0=\omega,\quad \alpha_n=\sqrt{\omega^2-\left(\lambda_{in}^{(n)}\right)^2},\lambda_{in}^{(n)}=\begin{cases}n\pi\\ \left(n+\dfrac{1}{2}\right)\pi\end{cases},\quad n=1,2,...,\\ \psi_{in}^{(n)}(y)=\frac{1}{2}\left(e^{-y\lambda_{in}^{(n)}+\lambda_{in}^{(n)}}+e^{y\lambda_{in}^{(n)}+3\lambda_{in}^{(n)}}\right).\end{gathered}\tag{6}$$

Здесь α_i, i = 0,1,2,…, волновые числа мод в канале, $R_{0i},\psi_i(y), i=1,2,\ldots$ соответственно коэффициенты трансформации нулевой моды в i-ю и собственные функции, представляющие поперечное распределение в модах. Отсюда, при $x=-0$, получаем величину производной φ:

$$\begin{gathered}\frac{\partial\varphi}{\partial x}=i\alpha_0\left(e^{i\alpha_0x}-R_{00}e^{-i\alpha_0x}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}-\sum_{n=1}^\infty i\alpha_iR_{0n}\psi_{in}^{(n)}(y)e^{-i\alpha_nx},\\ \left.\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right|_{x=-0}=i\alpha_0\left(1-R_{00}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}-\sum_{n=1}^\infty i\alpha_nR_{0n}\psi_{in}^{(n)}(y)\end{gathered}.\tag{7}$$

В итоге получаем систему уравнений для $\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}$ при $x = -0$, $|y| \geq 1$. Определяя $\frac{\partial\varphi}{\partial x_0}$ в указанных областях из уравнений (4), (5) и (7), воспользовавшись уравнениями (1), (2) и (3), можно определить всё акустическое поле в областях 1, 2, 3.

$$\frac{\partial\varphi(x_0,-y_0)}{\partial x_0} = \frac{\partial\varphi(x_0,y_0)}{\partial x_0},$$

$$\left(\int_1^\infty G_1(0,y;0,y_0) + \left(G_3(0,y;0,-y_0) + G_3(0,y;0,y_0)\right)\right)\frac{\partial\varphi(y_0)}{\partial x_0}dy_0 = -\int_{-1}^1 G_3(0,y;0,y_0)\frac{\partial\varphi(0,y_0)}{\partial x_0}dy_0 =$$

$$= -\int_{-1}^1 G_3(0,y;0,y_0)\left(i\alpha_0\left(e^{i\alpha_0 x} - R_{00}e^{-i\alpha_0 x}\right)\frac{1}{\sqrt{2}} - \sum_{n=1}^{\infty} i\alpha_i R_{0n}\psi_{in}^{(n)}(y)e^{-i\alpha_n x}\right)_{x=-0} dy_0$$

Это интегральное уравнение Фредгольма 1-го рода относительно функции $\frac{\partial\varphi(0,y_0)}{\partial x_0}$ в интервале $y_0 \in [1,\infty]$. При этом коэффициент отражения и коэффициенты трансформации определятся из сравнения выражения (7) поля на выходе из канала с его выражением из уравнения (3) (система функций, $\{1, \psi_1(y), \psi_2(y), \ldots\}$ ортогональна).

2. Условия на срезе канала. Условия на срезе канала можно сформулировать, воспользовавшись результатами работ [12; 13]. С учётом непрерывного спектра поле акустического давления в области (3) в покоящемся газе представляется интегралом

$$p(x,y) = \int_{-\infty}^{\infty} A_\beta e^{i\alpha_c(\beta)x}\psi_c(y,\beta)\,d\beta, \quad \alpha_c = \sqrt{\omega^2 - \beta^2},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_c(y,\beta)\psi^*{}_c(y,\beta_1)dy = \delta(\beta - \beta_1), \quad \psi_c(y,\beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\beta y}. \tag{8}$$

Условие непрерывности поля давления $p[t,x,y]\big|_{x\to-0} = p[t,x,y]\big|_{x\to+0}$, $y \in [-1,1]$ на срезе сопла даёт интегральные соотношения (9) и (10) для акустического поля внутри сопла с полем вне сопла (точнее, слева и справа от среза сопла):

$$(1 + R_{00}) = \left(\int_{-\infty}^{\infty} A[\beta]\int_{-1}^1 \psi_{in}^{(0)}(y)\psi_c(\beta,y)\,dyd\beta\right)_{x=+0}, \int_{-1}^1 \psi_{in}^{(0)}(\beta,y)\psi_c(\beta,y)\,dy = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{Sin[\beta]}{\beta}, \tag{9}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} R_{0n}\delta_{nj} = R_{0j} = \left(\int_{-\infty}^{\infty} A[\beta]\int_{-1}^{1}\psi_{in}^{(j)}(y)\psi_c(\beta,y)\,dyd\beta\right)_{x=+0}, \quad j=1,2,...,$$
$$\int_{-1}^{1}\psi_{in}^{(j)}(y)\psi_c(\beta,y)\,dy = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Sin[j\pi-\beta]}{j\pi-\beta}+\frac{Sin[j\pi+\beta]}{j\pi+\beta}\right). \qquad (10)$$

Здесь $\psi_{in}^{(j)}(y), \psi_{in}^{(0)}(y) = \frac{1}{\sqrt{2}}$ – нормированные собственные функции в канале:

$$\int_{-1}^{1}\psi_{in}^{(j)*}(y)\psi_{in}^{(l)}(y)\,dy = \delta_{jl}, \quad j,l = 0,1,2,...$$

Воспользуемся теперь законом сохранением импульса на линии среза сопла. Из уравнения (7) получим

$$\left\{\begin{matrix} |y|<1, & \left(\psi_{in}^{(0)}(y)\alpha_{in}^{(0)}(1-R_{00}) - \sum_{j=1}^{\infty} R_{0j}\alpha_{in}^{(j)}\psi_{in}^{(j)}(y)\right) \\ |y|\ge 1, & \frac{1}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x}p(x,y)\Big|_{x=-0}, p(x,y) \text{ определяется с помощью функции Грина, формула (3)}\right)\end{matrix}\right\}_{x=-0} =$$
$$= \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\beta\,\alpha_c(\beta)A[\beta]\varphi_c(\beta,y)\right)_{x=+0}, \quad \alpha_c(\beta) = \sqrt{\omega^2-\beta^2}.$$

(11)

Функция $p'_x(0,y)\equiv 0$ только если мы рассматриваем канал с фланцем. Чтобы этого не было, необходимо определить акустическое давление на линии среза сопла $\{x=0,\ y\in[-\infty,-1]\cup y\in[1,\infty]\}$. Для этого можно воспользоваться функцией Грина в области 3 (рис. 1).

$\alpha_{in}^{(0)} = \omega$, $\alpha_{in}^{(j)} = \sqrt{\omega^2-(\lambda_n/i)^2}$, λ_n – собственные числа в канале: для чётных мод $\lambda_n = in\pi,\ n=\pm1,\pm2,...,\pm n...$, для нечётных мод $i^2=-1,\ \lambda_n = i\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi,\ n=\pm1,\pm2,...$, как это следует из волнового уравнения. Умножим правую и левую часть равенства (10) на $\varphi_c^*(\beta,y)$ и проинтегрируем по y $y\in(-\infty,\infty)$. В результате получим:

$$\left(\begin{matrix}\left(\alpha_{in}^{(0)}(1-R_{00})\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{Sin[\beta_1]}{\beta_1} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{j=1}^{\infty}R_{0j}\alpha_{in}^{(j)}\left(\frac{e^{\lambda_{in}^{(n)}}\mathrm{Sin}[\beta_1-i\lambda_{in}^{(n)}]}{\beta_1-i\lambda_{in}^{(n)}}+\frac{e^{3\lambda_n}\mathrm{Sin}[\beta_1+i\lambda_{in}^{(n)}]}{\beta_1+i\lambda_{in}^{(n)}}\right)\right)_{y\in[-1,1]} + \\ +\frac{1}{i}\left(\int_{-\infty}^{-1}+\int_{1}^{\infty}\right)dy\frac{\partial}{\partial x}p(x,y)\Big|_{|y|>1,x=-0}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}Exp[-i\beta_1 y]\end{matrix}\right) = \qquad (12)$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty}\alpha_c(\beta)A[\beta]\delta(\beta-\beta_1)\,d\beta = \alpha_c(\beta_1)A[\beta_1]$$

3. Определение поля вне канала. Дальнейшие вычисления необходимо провести в соответствии с определениями, приведёнными выше. Воспользуемся формулой (3) для вычисления интегралов:

$$p(0,y)=-\frac{1}{4\pi}\int_{-1}^{1}dy_0G_3[y,y0]\left(\frac{\partial}{\partial x}p(x,y_0)\right)_{x=-0},\quad y\in[-\infty,-1]\cup[1,\infty].$$

$$\left(\int_{-\infty}^{-1}+\int_{1}^{\infty}\right)dy\frac{\partial}{\partial x}p(x,y)\Big|_{|y|>1,x=-0}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}Exp[-i\beta_1 y],$$

$$\left(\frac{\partial p(x_0,y_0)}{\partial x_0}\right)\Bigg|_{x_0=-0,|y0|\le 1}=i\alpha_{in}^{(0)}(1-R_{00})\frac{1}{\sqrt{2}}-\sum_{n=1}^{\infty}i\alpha_{in}^{(n)}R_{0n}\psi_{in}^{(n)}(y_0)$$

$$p(0,x_0,y,y_0)=-\frac{1}{4\pi}\int_{-1}^{1}dy_0G_3[0,x_0,y,y0]\begin{pmatrix}i\alpha_{in}^{(0)}(1-R_{00})e^{i\alpha_{in}^{(0)}x_0}\frac{1}{\sqrt{2}}-\\-\sum_{n=1}^{\infty}i\alpha_{in}^{(n)}R_{0n}e^{-i\alpha_{in}^{(n)}x_0}\psi_{in}^{(n)}(y_0)\end{pmatrix},$$

$$\alpha_{in}^{(0)}=\omega,\alpha_{in}^{(j)}=\sqrt{\omega^2-(\lambda_j/i)^2},\lambda_j=ij\pi,\ j=\pm1,\pm2,...,\pm j...$$

$$p(0,y)=-\frac{1}{4\pi}\int_{-1}^{1}dy_0G_3[y,y0]\left(\frac{\partial}{\partial x}p(x,y_0)\right)_{x=-0},\quad y\in[-\infty,-1]\cup[1,\infty].$$

$$p(0,x_0,y)=-\frac{1}{4\pi}\int_{-1}^{1}dy_0G_3[0,x_0,y,y0]\begin{pmatrix}i\alpha_{in}^{(0)}(1-R_{00})e^{i\alpha_{in}^{(0)}x_0}\frac{1}{\sqrt{2}}-\\-\sum_{n=1}^{\infty}i\alpha_{in}^{(n)}R_{0n}e^{-i\alpha_{in}^{(n)}x_0}\psi_{in}^{(n)}(y_0)\end{pmatrix},$$

$$\frac{\partial}{\partial x_0}p(0,x_0,y)-$$

$$-\frac{1}{4\pi}\int_{-1}^{1}dy_0\frac{\partial}{\partial x_0}G_3[0,x_0,y,y0]\left(i\alpha_{in}^{(0)}(1-R_{00})e^{i\alpha_{in}^{(0)}x_0}\frac{1}{\sqrt{2}}-\sum_{n=1}^{\infty}i\alpha_{in}^{(n)}R_{0n}e^{-i\alpha_{in}^{(n)}x_0}\psi_{in}^{(n)}(y_0)\right)-$$

$$-\frac{1}{4\pi}\int_{-1}^{1}dy_0 2\mathrm{H}_0^{(1)}\left[\left|\omega\sqrt{x_0^2+(y-y0)^2}\right|\right]\begin{pmatrix}i\alpha_{in}^{(0)}(1-R_{00})\frac{\partial}{\partial x_0}e^{i\alpha_{in}^{(0)}x_0}\frac{1}{\sqrt{2}}-\\-\sum_{n=1}^{\infty}i\alpha_{in}^{(n)}R_{0n}\frac{\partial}{\partial x_0}e^{-i\alpha_{in}^{(n)}x_0}\psi_{in}^{(n)}(y_0)\end{pmatrix}=$$

$$x_0\to-0;$$

$$=-\frac{1}{4\pi}\left(\int_{-1}^{1}dy_0\frac{\partial}{\partial x_0}\mathrm{H}_0^{(1)}[\omega\sqrt{x_0^2+\left(y-y0\right)^2}]\right)_{x_0\to-0}\left(i\alpha_{in}^{(0)}\left(1-R_{00}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}-\sum_{n=1}^{\infty}i\alpha_{in}^{(n)}R_{0n}\psi_{in}^{(n)}\left(y_0\right)\right)-$$

$$-\frac{1}{4\pi}\int_{-1}^{1}dy_0\mathrm{H}_1^{(0)}[0,\left|y-y0\right|]\left(-\left(\alpha_{in}^{(0)}\right)^2\left(1-R_{00}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}-\sum_{n=1}^{\infty}\left(\alpha_{in}^{(n)}\right)^2R_{0n}\psi_{in}^{(n)}\left(y_0\right)\right).$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{H}_0^{(1)}[\omega\sqrt{x_0^2+\left(y-y_0\right)^2}]=-\frac{x_0\omega\mathrm{H}_1^{(1)}[\omega\sqrt{x_0^2+\left(y-y_0\right)^2}]}{\sqrt{x_0^2+\left(y-y_0\right)^2}}.$$

Здесь $\mathrm{H}_n^{(1)}$ – функция Ханкеля первого рода [14].

При стремлении x_0 к 0 этот член исчезает. В итоге получаем:

$$\frac{1}{4\pi}\left(\left(\alpha_{in}^{(0)}\right)^2\left(1-R_{00}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\int_{-\infty}^{-1}+\int_{1}^{\infty}\right)dyExp[-i\beta_1y]\int_{-1}^{1}dy_0H_1^{(0)}[0,\omega\left|y-y0\right|]+\right.$$

$$\left.\sum_{n=1}^{\infty}\left(\alpha_{in}^{(n)}\right)^2R_{0n}\left(\int_{-\infty}^{-1}+\int_{1}^{\infty}\right)dyExp[-i\beta_1y]\int_{-1}^{1}dy_0H_1^{(0)}[0,\omega\left|y-y0\right|]\psi_{in}^{(n)}\left(y_0\right)\right)=$$

$$=\left(\left(\alpha_{in}^{(0)}\right)^2\left(1-R_{00}\right)\overline{\psi^{(0)}}\left(\beta_1,\omega\right)+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\alpha_{in}^{(n)}\right)^2R_{0n}\overline{\psi^{(n)}}\left(\beta_1,\omega\right)\right),$$

$$\overline{\psi^{(0)}}\left(\beta_1,\omega\right)=\frac{1}{4\pi}\left(\int_{-\infty}^{-1}+\int_{1}^{\infty}\right)dyExp[-i\beta_1y]\frac{1}{\sqrt{2}}\int_{-1}^{1}dy_0H_1^{(0)}[0,\omega\left|y-y0\right|]$$

$$\overline{\psi^{(n)}}\left(\beta_1,\omega\right)=\frac{1}{4\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\int_{-\infty}^{-1}+\int_{1}^{\infty}\right)dyExp[-i\beta_1y]\int_{-1}^{1}dy_0H_1^{(0)}[0,\omega\left|y-y0\right|]\psi_{in}^{(n)}\left(y_0\right)$$

$$\psi_{in}^{(n)}\left(y_0\right)=\frac{1}{2}\left(e^{-y\lambda_{in}^{(n)}+\lambda_{in}^{(n)}}+e^{y\lambda_{in}^{(n)}+3\lambda_{in}^{(n)}}\right),\quad\lambda_{in}^{(n)}=in\pi,\quad n=1,2,3,...,$$

Воспользовавшись полученным результатом, выразим $A[\beta]$ через коэффициент отражения R_{00} и коэффициенты трансформации $R_{0j},\ j=1,2,...$:

$$\alpha_c\left(\beta_1\right)A[\beta_1]=(1-R_{00})\left(\alpha_{in}^{(0)}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{Sin[\beta_1]}{\beta_1}+\left(\alpha_{in}^{(0)}\right)^2\overline{\psi^{(0)}}\left(\beta_1,\omega\right)_{y\in[-1,1]}\right)-$$

$$-\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{j=1}^{\infty}R_{0j}\alpha_{in}^{(j)}\left(\frac{e^{\lambda_{in}^{(n)}}\mathrm{Sin}[\beta_1-i\lambda_{in}^{(n)}]}{\beta_1-i\lambda_{in}^{(n)}}+\frac{e^{3\lambda_n}\mathrm{Sin}[\beta_1+i\lambda_{in}^{(n)}]}{\beta_1+i\lambda_{in}^{(n)}}\right)+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\alpha_{in}^{(n)}\right)^2R_{0n}\overline{\psi^{(n)}}\left(\beta_1,\omega\right)\right) \tag{13}$$

$$\overline{\psi^{(0)}}\left(\beta_1,\omega\right)=\frac{1}{4\pi i}\left(\int_{-\infty}^{-1}+\int_{1}^{\infty}\right)dyExp[-i\beta_1y]\frac{1}{\sqrt{2}}\int_{-1}^{1}dy_0H_1^{(0)}[0,\omega\left|y-y0\right|],$$

$$\overline{\psi^{(n)}}\left(\beta_1,\omega\right)=\frac{1}{4\pi i}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\int_{-\infty}^{-1}+\int_{1}^{\infty}\right)dyExp[-i\beta_1y]\int_{-1}^{1}dy_0H_1^{(0)}[0,\omega\left|y-y0\right|]\psi_{in}^{(n)}\left(y_0\right).$$

Подставляя выражение [13] для $A[\beta_1]$ в формулы (9) и (10), получим систему уравнений относительно R_{00}, R_{0j}, $j=1,2,\ldots$ Эта система уравнений не вырождена, и, в соответствии с формулой $p(x,y)=\int_{-\infty}^{\infty} A_\beta e^{i\alpha(\beta)x}\psi_c(y,\beta,\omega)d\beta$ позволяет определить акустическое поле во всём объёме (в данном случае приближенно).

На рис. 2 представлена зависимость коэффициента $R_{00}(\omega)$ от ω в предположении, что субгармоники не возбуждаются. Красная линия – точное решение [1; 2]. В этом случае имеем

$$R_{00}=-\frac{1-I(\omega)}{1+I(\omega)},$$

$$I(\omega)=\int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{\omega^2-\beta^2}}\left(\frac{\omega}{\sqrt{\pi}}\frac{Sin[\beta]}{\beta}+\frac{\omega^2}{4\pi i}f(\omega,\beta)\right)\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{Sin[\beta]}{\beta}d\beta,$$

$$f(\omega,\beta)=\int_{-\infty}^{-1}dy\int_{-1}^{1}dy_0\,\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\beta y}\mathrm{H}_0^{(1)}\left(\omega|y-y_0|\right)+\int_1^\infty dy\int_{-1}^{1}dy_0\,\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\beta y}\mathrm{H}_0^{(1)}\left(\omega|y-y_0|\right)$$

$\mathrm{H}_0^{(1)}(z)$ – функция Ганкеля первого рода [14].

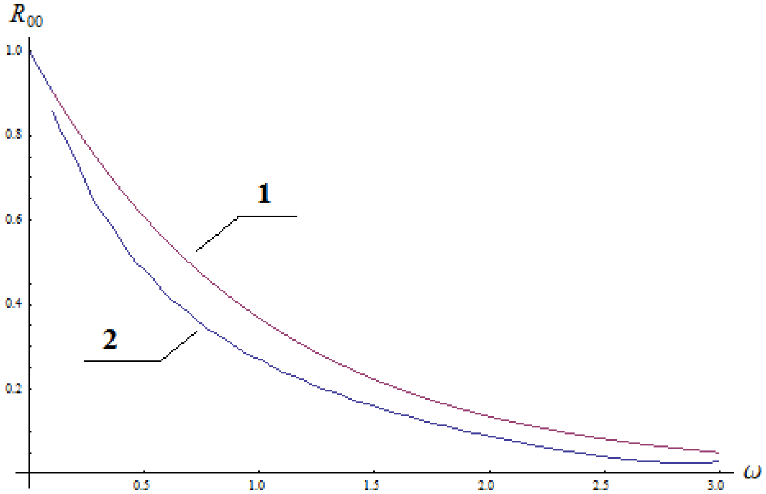


Рис. 2 / Fig. 2. Зависимость коэффициента $R_{00}(\omega)$ от ω. 1 – точное решение [1; 2], 2 – приближенное решение / Dependence of the coefficient $R_{00}(\omega)$ on ω. 1 – exact solution [1; 2], 2 – approximate solution.

Источник: составлено автором

На рис. 2: 1 – точное решение [1; 2], 2 – приближенное решение. Видно, что количественно и качественно использованное приближение для акустического поля на линии среза вне канала аппроксимирует точное решение в диапазоне $\omega \in [0,3]$. Можно высказать предположение о том, что существует другое приближение, которое даст лучшее совпадение, или надо действовать методом итераций.

При этом акустическое поле в области $x \in [0,\infty], y \in [0,\infty]$ при различных значениях ω выглядит следующим образом, представленным на рис. 3 и рис. 4. В последнем случае приведены лини уровня акустического давления.

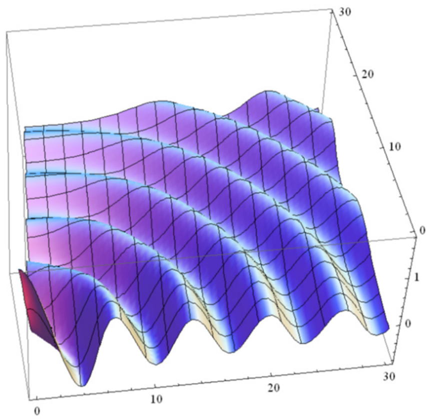


Рис. 3 / Fig. 3. Акустическое поле в области $x \in [0,\infty], y \in [0,\infty]$ при ω=1 / Acoustic field in the area $x \in [0,\infty], y \in [0,\infty]$ at ω=1

Источник: составлено автором

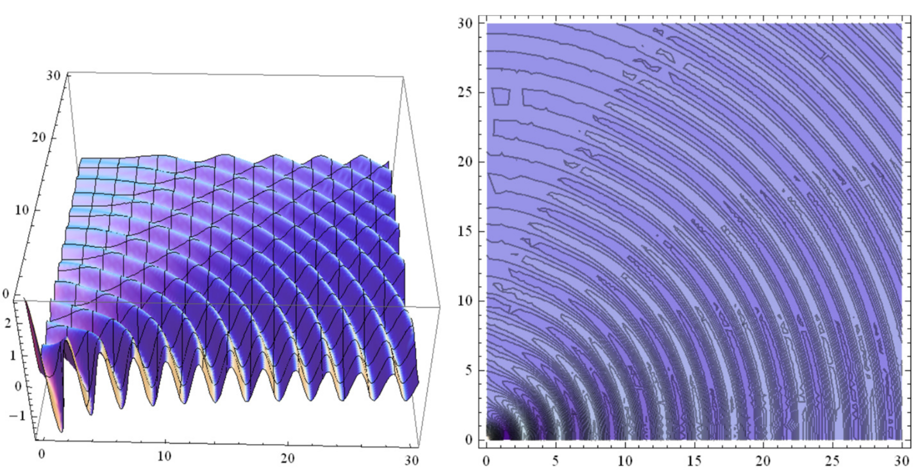


Рис. 4 / Fig. 4. Акустическое поле в области $x \in [0,\infty], y \in [0,\infty]$ при ω=2.5 / Acoustic field in the area $x \in [0,\infty], y \in [0,\infty]$ at ω=2.5

Источник: составлено автором

Для последнего случая диаграмма направленности акустического шума представлена на рис. 5.

Прямая линия показывает направление распространения волн в соответствии с вектором $\mathbf{n}:\mathbf{n}=\{Cos[\varphi],Sin[\varphi]\},\quad \mathbf{n}^2=1$.

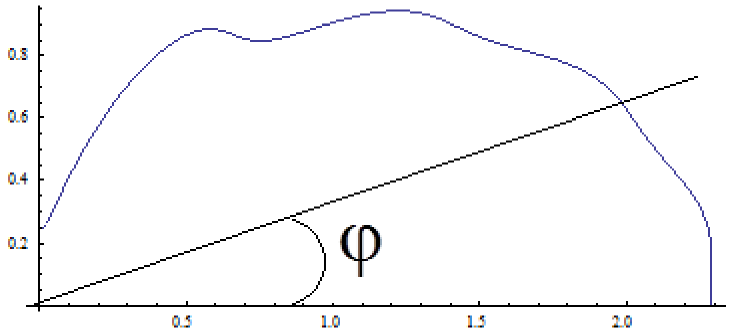


Рис. 5 / Fig. 5. Диаграмма направленности акустического шума
$\omega=2.5,\quad a\{Cos[\varphi],Sin[\varphi]\},a=Abs[\sqrt{\pi\omega Cos[\varphi]}A(\omega Sin[\varphi])]$ /
Directional diagram of acoustic noise
$\omega=2.5,\quad a\{Cos[\varphi],Sin[\varphi]\},a=Abs[\sqrt{\pi\omega Cos[\varphi]}A(\omega Sin[\varphi])]$.

Источник: составлено автором

При бóльших значениях ω, по-видимому, можно пользоваться приближением тонких пучков.

Заключение

Предложенный приближенный алгоритм решения задачи об излучении звука из канала количественно и качественно достаточно хорошо воспроизводит точное аналитическое решение работы [1]. Разработанный подход, по-видимому, можно перенести на случай истекающей из канала равновесной струи, когда газ движется внутри и вне канала, причём скорости движения газа различны. При этом моды струи и канала будут присутствовать в решении в явном виде.

Статья поступила в редакцию 14.09.2023 г.

ЛИТЕРАТУРА.

1. Вайнштейн Л. А. Строгое решение задачи о плоском волноводе с открытым концом // Известия Академии наук СССР. Серия физическая. 1948. Т. 12. № 2. С. 144–165.
2. Нобл Б. Применение метода Винера – Хопфа для решения дифференциальных уравнений в частных производных. М.: Иностранная литература, 1962. 279 с.

3. Жаров В. А., Хлопков Ю. И., Чернышев С. Л. Дифракция звуковых волн из канала в покоящийся газ. Точные решения // Труды МФТИ. 2010.Т. 2. № 3 (7). С. 152–157.
4. Munt R. M. The interaction of sound with a subsonic jet issuing from a semi-infinite cylindrical pipe // Journal of Fluid Mechanics. 1977. Vol. 83. Iss. 4. P. 609–640. DOI: 10.1017/S0022112077001384.
5. Munt R. M. Acoustic Transmission Properties of a Jet Pipe with Subsonic Jet Flow: I. The Cold Jet Reflection Coefficient // Journal of Sound and Vibration. 1990. Vol. 142. Iss. 3. P. 413–436. DOI: 10.1016/0022-460X(90)90659-N.
6. Gorazd Ł., Jurkiewicz J., Snakowska A. Experimental Verification of the Theoretical Model of Sound Radiation from an Unflanged Duct with Low Mean Flow // Archives of Acoustics. 2012. Vol. 37. No. 2. P. 227–236. DOI: 10.2478/v10168-012-0030-7.
7. Tolstykh A. I., Lipavskii M. V., Chigerev E. N. DNS of thin shear instability by ninth-order multioperators-based schemes // International Journal of Computing Science and Mathematics. 2007. Vol. 1. Iss. 2-4. P. 432–443. DOI: 10.1504/IJCSM.2007.016544.
8. Using Wavelet transforms and Linear Stochastic Estimation to study nearfield pressure and turbulent velocity signatures in free jets / Grassucci D., Camussi R., Kerhervé F., Jordan P., Grizzi S. // AIAA 2010-3954. 16th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference. Session: AA-36: Jet Noise – Experimental Studies II (07 June 2010 – 09 June 2010, Stockholm, Sweden). 2010. P. 3954. DOI: 10.2514/6.2010-3954.
9. Salven H., Grosch C. E. The continuous spectrum of Orr-Sommerfeld equation. Part 2. Eigenfunction expansions // Journal of Fluid Mechanic. 1981. Vol. 104. P. 445–465. DOI: 10.1017/S0022112081002991.
10. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. М.: Наука, 1974. 711 с.
11. Джексон Дж. Классическая электродинамика. М.: Мир, 1965. 702 с.
12. Копьев В. Ф., Шур М. Л. Азимутальные компоненты звукового поля турбулентной струи: результаты измерений и их использование для валидации современных методов расчета шума // Ученые записки ЦАГИ. 2010. Т. 41. № 1. С. 5–12.
13. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 6. Гидродинамика. М.: Наука, 1986. 621 с.
14. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Наука, Физматлит, 1971. 1108 с.

REFERENCES

1. Vainshtein L. A. [A rigorous solution to the problem of a flat waveguide with an open end]. In: *Izvestiya Akademii nauk SSSR. Seriya fizicheskaya* [Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics], 1948, vol. 12, no. 2, pp. 144–165.
2. Noble B. *Primeneniye metoda Vinera – Khopfa dlya resheniya differentsial'nykh uravneniy v chastnykh proizvodnykh* [Application of the Wiener–Hopf method for solving partial differential equations]. Moscow, Inostrannaya literatura Publ., 1962. 279 s.
3. Zharov V. A., Khlopkov Yu. I., Chernyshev S. L. [Diffraction of sound waves from a channel into a gas at rest. Exact solutions]. In: *Trudy MFTI* [Proceedings of Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University)], 2010, vol. 2, no. 3 (7), pp. 152–157.
4. Munt R. M. The interaction of sound with a subsonic jet issuing from a semi-infinite cylindrical pipe. In: *Journal of Fluid Mechanics*, 1977, vol. 83, iss. 4, pp. 609–640. DOI: 10.1017/S0022112077001384.

5. Munt R. M. Acoustic Transmission Properties of a Jet Pipe with Subsonic Jet Flow: I. The Cold Jet Reflection Coefficient. In: *Journal of Sound and Vibration*, 1990, vol. 142, iss. 3, pp. 413–436. DOI: 10.1016/0022-460X(90)90659-N.
6. Gorazd Ł., Jurkiewicz J., Snakowska A. Experimental Verification of the Theoretical Model of Sound Radiation from an Unflanged Duct with Low Mean Flow. In: *Archives of Acoustics*, 2012, vol. 37, no. 2, pp. 227–236. DOI: 10.2478/v10168-012-0030-7.
7. Tolstykh A. I., Lipavskii M. V., Chigerev E. N. DNS of thin shear instability by ninth-order multioperators-based schemes. In: *International Journal of Computing Science and Mathematics*, 2007, vol. 1, iss. 2-4, pp. 432–443. DOI: 10.1504/IJCSM.2007.016544.
8. Grassucci D., Camussi R., Kerhervé F., Jordan P., Grizzi S. Using Wavelet transforms and Linear Stochastic Estimation to study nearfield pressure and turbulent velocity signatures in free jets. In: *AIAA 2010-3954. 16th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference. Session: AA-36: Jet Noise – Experimental Studies II (07 June 2010 – 09 June 2010, Stockholm, Sweden)*, 2010, pp. 3954. DOI: 10.2514/6.2010-3954.
9. Salven H., Grosch C. E. The continuous spectrum of Orr-Sommerfeld equation. Part 2. Eigenfunction expansions. In: *Journal of Fluid Mechanic*, 1981, vol. 104, pp. 445–465. DOI: 10.1017/S0022112081002991.
10. Schlichting G. *Teoriya pogranichnogo sloya* [Theory of the boundary layer]. Moscow, Nauka Publ., 1974. 711 p.
11. Jackson J. *Klassicheskaya elektrodinamika* [Classical electrodynamics]. Moscow, Mir Publ., 1965. 702 p.
12. Kopiev V. F., Shur M. L. [Azimuthal components of turbulent jet sound field: measurement results and their implementation for validation of modern noise computation techniques]. In: *Uchenyye zapiski TSAGI* [TsAGI Science Journal], 2010, vol. 41, no. 1, pp. 5–12.
13. Landau L. D., Lifshits Ye. M. *Teoreticheskaya fizika. T. 6. Gidrodinamika* [Theoretical physics. Vol. 6. Hydrodynamics]. Moscow, Nauka Publ., 1986. 621 p.
14. Gradshtein I. S., Ryzhik I. M. *Tablitsy integralov, summ, ryadov i proizvedeniy* [Tables of integrals, sums, series and products]. Moscow, Nauka Publ., Fizmatlit Publ., 1971. 1108 p.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ

Жаров Владимир Алексеевич – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Центрального аэрогидродинамического института имени профессора Н. Е. Жуковского;
e-mail: v_zharov@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHOR

Vladimir A. Zharov – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Leading Researcher, Central Aerohydrodynamic Institute named after N. E. Zhukovsky;
e-mail: v_zharov@mail.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Жаров В. А. Излучение акустических волн из плоского канала, приближенное решение // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2023. № 4. С. 19–33.
DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-19-33

FOR CITATION

Zharov V. A. Radiation of acoustic waves from a flat channel, approximate solution. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2023, no. 4, pp. 19–33.
DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-19-33

УДК 533 6.011
DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-34-48

АНАЛИТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПОСТУПАТЕЛЬНО НЕРАВНОВЕСНОЙ ДИНАМИКИ УДАРНО-СЖАТЫХ БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ ГАЗОВ

Кузнецов М. М.[1], Кузнецов Г. В.[1], Паренкина В. И.[2], Сатюков Д. Г.[1], Халиков Р. Ф.[1]

*[1] Государственный университет просвещения
141014, Московская область, г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24, Российская Федерация*

*[2] Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)
125993, г. Москва, Волоколамское шоссе, д. 4, Российская Федерация*

Аннотация
Цель: на основе асимптотических и приближенных теоретических методов решения системы кинетических уравнений Больцмана для ударно сжатой бинарной смеси газов найти аналитические представления функций распределения компонентов смеси.
Методы. Применялись асимптотические и вариационные методы математической физики.
Результаты. Найдены асимптотические и приближенные аналитические выражения для функций распределения компонентов ударно-сжатой бинарной смеси газов. Для известной в литературе модификации метода Тамма – Мотт-Смита впервые доказано выполнение законов сохранения потоков массы, импульса и энергии в произвольном сечении внутри ударной волны. Ранее подобное доказательство в литературе отсутствовало. Важность подобного доказательства обусловлена тем, что при применении классического метода Тамма – Мотт-Смита к бинарным смесям газов невозможно обеспечить выполнение законов сохранения внутри фронта ударной волны.
Теоретическая и практическая значимость. Полученные аналитические результаты имеют существенное значение как для выяснения условий ускорения скоростей кинетических процессов в структуре ударных волн, так и для определения оптимальных условий проведения соответствующих экспериментов в ударных трубах.
Ключевые слова: асимптотическая модель, эффект перехлёста, рэлеевская смесь, неравновесность

ANALYTICAL MODELS OF TRANSLATIONALLY NONEQUILIBRIUM DYNAMICS OF SHOCK-COMPRESSED BINARY GAS MIXTURES

M. Kuznetsov [1]***, G. Kuznetsov*** [1]***, V. Parenkina*** [2]***, D. Satyukov*** [1]***, R. Halikov*** [1]

[1] *Federal State University of Education*
24 ulitsa Very Voloshinoi, Mytishchi 141014, Moscow Region, Russian Federation

[2] *Moscow Aviation Institute (National Research University)*
Volokolamskoe shossse 4, Moscow 125993, Russian Federation

Abstract
Aim. On the basis of asymptotic and approximate theoretical methods for solving the system of kinetic Boltzmann equations for a shock compressed binary mixture of gases, analytical representations of the distribution functions of the components of the mixture are found.
Methods. Asymptotic and variational methods of mathematical physics were used.
Results. Asymptotic and approximate analytical expressions are found for the distribution functions of components of a shock-compressed binary mixture of gases. For a modification of the Tamm–Mott-Smith method known in the literature, the laws of conservation of mass, momentum and energy fluxes in an arbitrary section inside a shock wave are proved for the first time. Previously, there was no such proof in the literature. The importance of such a proof is due to the fact that when applying the classical Tamm–Mott-Smith method to binary mixtures of gases, it is impossible to ensure compliance with the conservation laws inside the shock wave front.
Research implications. The obtained analytical results are essential both for elucidating the conditions for accelerating the velocities of kinetic processes in the structure of shock waves, and for determining the optimal conditions for conducting appropriate experiments in shock tubes.
Keywords: asymptotic model, overlap effect, Rayleigh mixture, disequilibrium

Введение

В настоящей работе рассматриваются бинарные смеси газов с произвольными величинами концентраций её компонентов в ударной волне.

В случае сильно диспергированных смесей рассматривается предельный переход по двум параметрам: относительной плотности и относительной молекулярной массе компонентов смеси. При этом сами функции распределения в принципе являются асимптотически точными аналитическими решениями системы уравнений Больцмана.

В работах [1; 2] авторам удалось отказаться от обычно постулируемого вида функций распределения в пространстве молекулярных скоростей [3] и заменить его асимптотическим представлением этих функций. Конкретный вид этих функций находится из аналитического решения системы асимптотически упрощённых уравнений Больцмана для компонентов рэлеевской смеси газов.

В данной работе, как и в [1; 2], использовался следующий предельный переход по относительным величинам концентраций и молекулярных масс компонентов этой смеси.

$$\frac{n_h}{n_l} \equiv \nu \to 0,\ \frac{m_h}{m_l} \equiv b \to \infty, \frac{n_h m_h}{n_l m_l} = \nu \cdot b \equiv \tilde{\rho} = const \ll 1, \tag{1}$$

где n_h, n_l, m_h, m_l – соответственно концентрации и молекулярные массы компонентов.

Нетрудно видеть, что предельный переход (1) соответствует следующему соотношению

$$L_{ll} \ll L_{lh} \ll L_{hh}\,, \tag{2}$$

где L_{ll}, L_{lh}, L_{hh} – длины свободного пробега соответственно лёгкого-лёгкого, лёгкого-тяжёлого, тяжёлого-тяжёлого компонентов.

В силу предельного перехода (1) и неравенств (2) неоднородная релаксация лёгкого и тяжёлого компонентов разбивается в первом приближении по малому параметру $\tilde{\rho}$ на два независимых этапа.

На первом этапе в силу $\nu \to 0$ релаксирует к состоянию равновесия только лёгкий компонент, поскольку влияние тяжёлого компонента на релаксацию лёгкого мало, и им можно пренебречь с точностью до величин порядка $\tilde{\rho} \ll 1$.

Тяжёлый компонент, проходя через фронт ударной волны шириной L_{ll} в лёгком газе, не претерпевает существенных изменений, поскольку рассеяние тяжёлых молекул на лёгкие является чрезвычайно малым при $\frac{m_l}{m_h} \to 0$ [4]. Ввиду этого макроскопические параметры максвелловского распределения тяжёлого компонента: плотность n_h, скорость u_h и температура T_h, остаются неизменными на протяжении всей длины зоны релаксации лёгкого компонента L_{ll}. Они, таким образом, совпадают с параметрами «холодного равновесного состояния» вверх по потоку вдали от переднего фронта скачка в лёгком газе.

В силу асимптотической постановки рассматриваемая задача сильно упрощается по сравнению со случаем сравнимых по величине концентраций обоих компонентов. Известно, что в случае сравнимых концентраций релаксация обоих компонентов происходит параллельно, а не последовательно [5].

Следует также отметить, что качественное различие поступательной релаксации в смесях со сравнимыми величинами концентраций и молекулярных масс лёгкого и тяжёлого компонентов и в сильно диспергированных таких смесях сопровождается и сильным различием в практическом использовании этой релаксации. Как показали численные расчёты фронтов ударных волн [6], эффекты поступательной неравновесности в недиспергированных смесях наиболее интересны в задачах спуска космических аппаратов в атмосферах планет Солнечной системы. Было показано, что учёт поступательной неравновесности особенно важен при расчёте скоростей обменных химических реакций.

Эффекты поступательной неравновесности в сильно диспергированных смесях интересны для практического использования в лабораторных земных условиях (например, при эффективном вкладывании энергии в тяжёлый компонент смеси в схемах управляемого термоядерного синтеза) [7].

1. Релаксация тяжёлого компонента рэлеевской смеси

Как указывалось во Введении, равновесное состояние лёгкого компонента непрерывно сохраняется на масштабе релаксации тяжёлого компонента L_{lh}, являясь искомым решением для этого компонента.

Таким образом, для лёгкого компонента асимптотическое решение (обозначим его $f_{l,asy}$) совпадает с максвелловским распределением $F_l^{(M)}$ для лёгкого компонента в конце зоны его релаксации

$$f_{l,asy} = F_l^{(M)} \tag{1.1}$$

где

$$F_l^{(M)} = n_{l,asy}\left(\frac{\beta_l}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\beta_l\left(\xi_l - u_{l,asy}\right)^2\right)\exp\left(-\beta_l\eta_l^2\right)\exp\left(-\beta_l\varsigma_l^2\right) \tag{1.2}$$

причём $n_{l,asy}$, $T_{l,asy}$, $u_{l,asy}$ – соответственно парциальная числовая плотность, температура и макроскорость лёгкого компонента в конце его зоны релаксации, $\beta_l = \frac{m_l}{2kT_{l,asy}}$.

Начальное условие для релаксации тяжёлого компонента естественно задать в конце зоны релаксации лёгкого компонента на длине δ_l, причём $\delta_l \approx L_{ll}$. Численно в качестве δ_l можно взять, например, длину, на которой величина плотности n_l меняется от половины до полного значения $n_{l,asy}$ в конце зоны релаксации лёгкого компонента.

Как отмечалось выше, ввиду «замороженности» поступательной релаксации тяжёлого компонента на масштабе L_{ll} начальное условие для «размороженности» релаксации тяжёлого компонента на масштабе L_{lh} будет совпадать с «холодным» распределением тяжёлого компонента $F_{h,-\infty}^{(M)}$ перед фронтом скачка в лёгком газе.

Заметим, что перед фронтом скачка оба компонента находятся в «холодном» поступательном равновесии и все макропараметры их парциальных максвелловских распределений будут одинаковыми. Это касается среднемассовых скоростей

$$u_{l,-\infty} = u_{h,-\infty} \equiv u_{-\infty} \tag{1.3}$$

и парциальных температур

$$T_{l,-\infty} = T_{h,-\infty} \equiv T_{-\infty}. \tag{1.4}$$

При этом различными остаются молекулярные массы компонентов $m_l \neq m_h$, $m_l \ll m_h$ и концентрации $n_l \neq n_h$, $n_h \ll n_l$.

Обозначим это «холодное» распределение как $F_{h,\delta}^{(M)}$, где

$$F_{h,\delta}^{(M)} = n_{h,\delta}\left(\frac{\beta_h}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \exp(-\beta_h(\xi_h - u_{-\infty})^2)\exp\left(-\beta_h\eta_h^2\right)\exp\left(-\beta_h\varsigma_h^2\right) \tag{1.5}$$

Здесь параметры $n_{h,\delta}$, $T_{h,\delta}$, $u_{h,-\infty}$– соответственно парциальная числовая плотность, температура и макроскорость тяжелого компонента в начале его зоны релаксации, $\beta_h = \frac{m_h}{2kT_{h,\delta}}$.

Зона релаксации тяжёлого компонента завершается на распределении $F_{h,s}^{(M)}$, которое равно

$$F_{h,s}^{(M)} = n_{h,s}\left(\frac{\beta_h}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\beta_h\left(\xi_h - u_{h,s}\right)^2\right)\exp\left(-\beta_h \eta_h^2\right)\exp\left(-\beta_h \varsigma_h^2\right), \tag{1.6}$$

где оба распределения имеют одинаковые средние парциальные скорости

$$u_{h,s} = u_{l,asy} \equiv u_s, \tag{1.7}$$

и средние парциальные температуры

$$T_{h,s} = T_{l,asy} \equiv T_s. \tag{1.8}$$

Как мы видим, определение функции распределения для тяжёлого компонента f_h сводится в главном приближении по малому параметру $\tilde{\rho}$ к решению одного кинетического уравнения Больцмана с перекрёстным интегралом столкновений. Для дальнейшего изложения уравнение Больцмана будет удобно записать в следующем виде [8]:

$$\frac{df_h}{dt} = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_{\overrightarrow{\Xi_l}} g_{lh}\left(f_l' f_h' - f_l f_h\right) b db d\varepsilon d^3 \Xi_l, \tag{1.9}$$

где левая часть равенства (11) является, так называемой, полной производной [МСС], $\overrightarrow{\Xi_l}$ и $\overrightarrow{\Xi_h}$ – скорости молекул до столкновения, $\overrightarrow{\Xi_l}'$ и $\overrightarrow{\Xi_h}'$ – после столкновения, причём $f_l' = f_l'(\overrightarrow{\Xi_l}', t)$; $f_h' = f_h'(\overrightarrow{\Xi_h}', t)$; $f_l = f_l(\overrightarrow{\Xi_l}, t)$; $f_h = f_h(\overrightarrow{\Xi_h}, t)$, b – прицельное расстояние; ε – угловой (азимутальный) параметр столкновения, $g_{lh} = \left|\overrightarrow{\Xi_l} - \overrightarrow{\Xi_h}\right|$ – модуль относительной скорости лёгкой и тяжёлой молекул [9], $d^3\Xi_l = d\Xi_{lx} d\Xi_{ly} d\Xi_{lz}$.

Как указано в работе [8]: «уравнение Больцмана описывает процесс превращения произвольного начального распределения в равновесное максвелловское распределение. Время релаксации такого процесса определяется интенсивностью диссипативных процессов (интегралом столкновений), т. е. эффективностью столкновений как механизма, формирующего максвелловское распределение. Для оценки τ по порядку величины можно считать, что»:

$$\tau \sim \frac{f}{\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_{\overrightarrow{\Xi_l}} g_{lh}\left(f_l' f_h' - f_l f_h\right) b db d\varepsilon d\overrightarrow{\Xi_l}} \sim \frac{1}{r_0^2 \overline{v_l} n_l} \tag{1.10}$$

где r_0 – радиус молекулы модели газа из «твёрдых сфер» [3]; $\overline{v_l}, n_l$ – соответственно средняя тепловая скорость и плотность газа из молекул лёгкого компонента.

Далее будет рассмотрен случай стационарного решения для функции распределения f_l, f_h. Поэтому уравнение (1.9) запишется в виде:

$$\xi_{hx} \frac{\partial}{\partial x} f_h(x) = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g_{lh}\left(F_l^{(M)'} f_h' - F_l^{(M)} f_h\right) b db d\varepsilon d\xi_l d\eta_l d\varsigma_l \tag{1.11}$$

Причём в формуле (1.9) интеграл по трёхмерному пространству $\overrightarrow{\Xi_l}$ соответствует трём однократным:

$$\int\limits_{\overrightarrow{\Xi_l}} \dots d^3\Xi_l = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \dots d\xi_l d\eta_l d\varsigma_l \qquad (1.12)$$

***

Изменение функции распределения тяжёлого компонента f_h удобно представить в виде суммы:

$$f_h(\vec{\Xi}, x) = F_{h,s}^{(M)}(\vec{\Xi}) - \Delta f_h(x), \qquad (1.13)$$

где x – координата вдоль потока в ударной волне.

Нетрудно показать, что для добавки $\Delta f_h(x)$ справедливо линейное дифференциальное уравнение первого порядка:

$$\xi_{hx}\frac{\partial}{\partial x}\Delta f_h(x) = \Delta f_h(x)\cdot Z\left(\overrightarrow{\Xi_h}\right), \qquad (1.14)$$

где $Z\left(\overrightarrow{\Xi_h}\right)$ – интегральное сечение взаимодействия молекул тяжёлого и лёгкого компонентов, причём в силу равенства (11) величина $Z\left(\overrightarrow{\Xi_h}\right)$ равна τ^{-1}, т. е.

$$Z\left(\overrightarrow{\Xi_h}\right) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\chi \int_0^{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\left[F_l^{(M)'} - F_l^{(M)}\right] B(g_{lh},\chi)\, d\varepsilon\, d\xi_l d\eta_l d\varsigma_l. \quad (1.15)$$

Множитель $B(g_{lh},\chi)$ в формуле (1.15) пропорционален дифференциальному сечению рассеяния [9]. Рассмотрим в качестве примера две наиболее простых модели молекулярных соударений, для которых функция $B(g_{lh},\chi)$ принимает наиболее простой вид:

1) модель молекул из «твёрдых сфер»

$$B(g_{lh},\chi) = g_{lh}\sigma_{lh}^2 \sin\chi\cos\chi, \qquad (1.16)$$

где $\sigma_{lh} = \frac{\sigma_l+\sigma_h}{2}$, σ_l, σ_h – соответственно диаметры молекул – «твёрдых сфер» лёгкого и тяжёлого компонентов;

2) модель «псевдомаксвелловских» молекул

$$\mathrm{B}(\mathrm{g}_{\mathrm{lh}},\chi) = \varphi_{\mathrm{lh}}\sin\chi\cos\chi\ , \qquad (1.17)$$

где величина φ_{lh} – имеет размерность удельного потока скорости сталкивающихся молекул через единицу площади сферы соударений единичного радиуса, причём $\varphi_{\mathrm{lh}} = \mathrm{const}$.

На основе решения уравнения (1.14) искомая функция распределения тяжёлого компонента $\mathrm{f_h}$ будет иметь следующий вид:

$$f_h(\overrightarrow{c_h}, x) = F_{h,s}^{(M)} - \left[F_{h,s}^{(M)} - F_{h,\delta}^{(M)}\right]\exp\left(-\frac{Z\left(\overrightarrow{\Xi_h}\right)(x-\delta_l)}{c_{hx}}\right), \qquad (1.18)$$

где $F_{h,\delta}^{(M)}$ и $F_{h,s}^{(M)}$ – максвелловские распределения молекул тяжёлого компонента соответственно в начале его зоны релаксации и в её конце.

На основе равенства (1.18) можно построить решение для f_h в следующей безразмерной форме:

$$\frac{F_{h,s}^{(M)} - f_h(\overrightarrow{c_h}, x)}{\left[F_{h,s}^{(M)} - F_{h,\delta}^{(M)}\right]} = \exp(-\Gamma), \qquad (1.19)$$

где

$$\Gamma = -\frac{Z\left(\overrightarrow{\Xi_h}\right)(x - \delta_l)}{c_{hx}} \tag{1.20}$$

Решение (1.19) имеет чрезвычайно простой и универсальный вид и обычно характерно для модельного кинетического уравнения Бхатнагара–Гросса–Крука [3].

Однако, в отличие от заранее постулированного упрощённого вида модельного оператора столкновений, в рассматриваемом кинетическом уравнении (1.14) такое эквивалентное упрощение не постулируется, а достигается в силу приведённого выше асимптотического анализа задачи.

Дальнейшие строгие асимптотические преобразования интеграла столкновений в правой части уравнения (1.11) связаны с приведением его к дифференциальной форме, совпадающей в ряде случаев с интегралом столкновений в правой части кинетического уравнения Фоккер – Планка [10].

Ранее подобный метод был развит в работах [11; 12]. Целью этих работ было обоснование применение метода Чепмена – Энскога для вывода уравнения движения сильнодиспергированных смесей газов.

Как оказалось, наиболее адекватным методом аналитического исследования течений сильнодиспергированных газов является метод приведения интеграла столкновений к дифференциальной форме, впервые предложенный Г. А. Лорентцом [4; 11].

Преимуществом метода Лорентца по сравнению с методом Чепмена – Энскога является его большая область применимости к описанию движения газа, включая как режимы сплошной среды, так и переходные режимы по параметру разреженности (числу Кнудсена). Метод Лорентца применим также и для исследования структуры ударной волны в диспергированных средах.

Упрощение интеграла столкновений в методе Лорентца можно начать уже с интеграла столкновений в кинетическом уравнении (1.9) при неизвестном виде обоих искомых функций f_l и f_h.

В рассматриваемой задаче, как уже отмечалось ранее, функция f_l известна и совпадает с равновесным распределением Максвелла ${F_l}^{(M)}$ с макроскопическими параметрами (6), (7), постоянными по всей зоне релаксации тяжёлого компонента.

2. Модифицированный метод Тамма – Мотт-Смита

Известно, что для аналитического исследования задачи о структуре ударной волны в однокомпонентных газах в смысле простоты решения кинетического уравнения Больцмана и его практического использования наиболее эффективным оказался метод Тамма – Мотт-Смита [3].

Однако непосредственное использование этого метода в бинарных смесях газов оказалось невозможным из-за невыполнения законов сохранения потоков массы, импульса и энергии в произвольном сечении внутри фронта ударной волны [13].

В работе [14] был предложен модифицированный метод Тамма – Мотт-Смита, сохраняющий все его преимущества и для смесей газов без доказательства законов сохранения. Ниже в нашей работе приводится соответствующее доказательство.

Суть модификации метода Тамма – Мотт-Смита проще всего пояснить на примере бинарной смеси газов. Согласно этой модификации, представление функции распределения для молекул какого-либо компонента содержало две различные части. Первая часть совпадала с представлением функций распределения для этого компонента по методу Тамма – Мотт-Смита. Вторая часть (в виде добавки к первой) представляла собой произведение разности между распределениями Максвелла другого компонента, умноженной на весовой множитель. В работе [14] эта модификация была распространена на многокомпонентную смесь, причём функция распределения имела вид:

$$f_i(\boldsymbol{c},x)=\frac{1-h(x)}{2}f_i^-(\boldsymbol{c})+\frac{1+h(x)}{2}f_i^+(\boldsymbol{c})+\frac{1}{2}\sum_{\substack{i=1\\ j\neq 2}}^{N}\ \beta_{ij}\tilde{h}(x)[f_j^+(\boldsymbol{c})-f_j^-(\boldsymbol{c})]\ ,\ i=1,2,\dots,N. \qquad (2.1)$$

Здесь f_i^- и f_i^+ – поступательно равновесные максвелловские распределения

$$f_i^-(c)=n_i^-\ .m_i^{\frac{3}{2}}(2\pi kT^-)^{-3/2}\exp[\text{-}m_i(c-v^-)^2/2kT^-] \qquad (2.2)$$

$$f_i^+(c)=n_i^-\ .m_i^{\frac{3}{2}}(2\pi kT^+)^{-3/2}\exp[\text{-}m_i(c-v^+)^2/2kT^+] \qquad (2.3)$$

Индексы «-» и «+» в формулах (2.1)–(2.3) относятся к максвелловским функциям распределениям по собственным тепловым скоростям молекул и макроскопическим параметрам этих функций соответственно на входе («-») и выходе («+») ударной волны, m_i – масса молекулы i-го компонента. Для компонента j формулы для максвелловских функций распределения, аналогичные (2.2), (2.3), получаются формальной заменой в них индекса i на индекс j, причём β_{ij} равно m_j/m_i.

В равенстве (2.1) функции h(x) и $\tilde{h}(x)$ удовлетворяют следующим граничным условиям:

$$h(-\infty)=-1, h(+\infty)=1, \tilde{h}(-\infty)=\tilde{h}(+\infty)=0 \qquad (2.4)$$

Соотношения (2.1)–(2.4) и представляют, собственно, модифицированную формулировку метода Тамма – Мотт-Смита. Главное в этой модификации – добавление к первым двум слагаемым, представляющим обычную формулировку метода, т. н. «Анзаца», третьего, содержащего функцию $\tilde{h}(x)$.

Добавление этого слагаемого и является главным достижением в формулировке модифицированного метода, поскольку благодаря ему автоматически выполняется обязательное требование выполнения законов сохранения переноса парциальных масс, суммарного импульса и суммарной энергии смеси газов в любом сечении внутри ударной волны. Замечательным достоинством модифицированного подхода является также и то, что при переходе к бинарной смеси газов число неизвестных функций остаётся тем же, что и в простом газе, т. е. две:

$$h(\text{x}) \text{ и } \tilde{h}(x) \tag{2.5}$$

В связи с этим заметим также, что использование обычной формулировки метода Тамма – Мотт-Смита, как было показано в работе [13], невозможно при определении структуры изменения макропараметров внутри ударной волны, ввиду невыполнения законов сохранения. Для их выполнения обычно используют другую, менее совершенную модификацию «Анзац», использованную, например, в работе [15], где помимо функций (2.5) приходится считать переменными и параметры: T^+, v^+.

Это обстоятельство делает практически невозможным получение аналитического решения с помощью бимодальной аппроксимации функций распределения в ударной волне [15; 16].

В работе [14] утверждение об автоматическом выполнении законов сохранение не было проверено. Ниже мы дадим проверку этого утверждения.

3. Проверка выполнения законов сохранения потоков массы, импульсов и энергии при произвольном значении координаты x внутри волны

3.1. Сохранение потока массы каждого компонента «i»

Поток массы каждого компонента «i» при произвольном значении координаты x

$$< c_x m_i f_i > \tag{3.1.1}$$

вычисляется интегрированием по фазовому пространству скоростей молекул $\vec{c}$ с использованием равенств (2.1)–(2.3):

$$\begin{aligned} < m_i c_x f_i \ \ > &= \frac{1}{2}[< m_i c_x f_i^+(\vec{c}) > + < c_x f_i^-(\vec{c}) >] \\ &+ \frac{h(x)}{2}[< m_i c_x f_i^+(\vec{c}) > - < m_i c_x f_i^-(\vec{c}) >] + \\ &+ \tilde{h}(x) \sum_{\substack{i=1 \\ j\neq 2}}^{N} \ \frac{1}{2}\left[< m_j c_x f_j^+(\vec{c}) > - < m_j c_x f_j^-(\vec{c}) >\right], \end{aligned} \tag{3.1.2}$$

3.2. Сохранение суммарного потока импульсов компонентов смеси

Как известно [4], в смесях газов сохраняется суммарный поток импульсов компонентов смеси

$$< \sum_{i=1}^{N} \quad m_i {c_x}^2 f_i > \tag{3.2.1}$$

Как в предыдущем подпункте **3.1.** используем соотношения (2.1)–(2.3). Тогда для выражения (3.2.1) получим следующее представление:

$$< \sum_{i=1}^{N} m_i \, {c_x}^2 f_i > = \frac{1}{2}\left[< \sum_{i=1}^{N} \quad m_i {c_x}^2 f_i^+(\vec{c}) > + < \sum_{i=1}^{N} \quad m_i {c_x}^2 f_i^-(\vec{c}) >\right] +$$

$$+ h(x)\frac{1}{2}\left[< \sum_{i=1}^{N} \quad m_i {c_x}^2 f_i^+(\vec{c}) > - < \sum_{i=1}^{N} \quad m_i {c_x}^2 f_i^-(\vec{c}) >\right] +$$

$$+\tilde{h}(x)\left[<\sum_{j=1}^{N} \frac{m_j}{2} {c_x}^2 f_j^+(\vec{c})>-<\sum_{j=1}^{N} \frac{m_j}{2} {c_x}^2 f_j^-(\vec{c})>\right] \quad (3.2.2)$$

3.3. Сохранение суммарного потока энергии компонентов смеси

Подобно сохранению суммарного импульса в смесях газов сохраняется суммарный поток энергии компонентов смеси [4].

$$<\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{m_i\ c^2}{2} + E_i\right) c_x f_i>, \quad (3.3.1)$$

где E_i внутренняя энергия молекул смеси газов.

Используя модифицированный «Анзац» (2.1) аналогично соотношениям (3.1.2) и (3.2.2), получим

$$<\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{m_i\ c^2}{2} + E_i\right) c_x f_i> = \frac{1}{2}\left[<\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{m_i\ c^2}{2} + E_i\right) c_x f_i^+(\vec{c})>+<\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{m_i\ c^2}{2} + E_i\right) c_x f_i^-(\vec{c})>\right] + \frac{h(x)}{2}\left[<\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{m_i\ c^2}{2} + E_i\right) c_x f_i^+(\vec{c})>-<\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{m_i\ c^2}{2} + E_i\right) c_x f_i^-(\vec{c})>\right] + \frac{\tilde{h}(x)}{2}\left[<\sum_{j=1}^{N} \left(\frac{m_j\ c^2}{2} + E_j\right) c_x f_j^+(\vec{c})>-<\sum_{j=1}^{N} \left(\frac{m_j\ c^2}{2} + E_j\right) c_x f_j^-(\vec{c})>\right] \quad (3.3.2)$$

Сохранение потоков макровеличин смеси газов, указанных в разделе ***3,*** *вытекает из равенств (3.1.1) – (3.3.2) следующим образом:*

Левые части указанных равенств основаны на интегрировании по всему фазовому пространству тепловых скоростей молекул $\vec{c}$ и взяты при произвольном значении координаты x внутри ударной волны, поскольку эта координата входит в число аргументов функции распределения молекул f_i, причём

$$f_i = f_i(\vec{c}, x) \quad (3.3.3)$$

1. В правой же части равенств расстояние x входит только в координатные функции (2.5). Такая факторизация фазового пространства, как известно [4], характерна вообще для моментных методов решения уравнения Больцмана и, в частности, для классического «Анзаца» Тамма – Мотт-Смита [3; 9] и рассматриваемой его модификации (2.1) [14].

Важно отметить, что каждая из координатных функций (2.5) умножается на квадратную скобку, в которой содержатся левые и правые части соотношений Рэнкина – Гюгонио в смесях газов. Левые и правые части этих соотношений относятся соответственно к левой ($x \to -\infty$) и к правой ($x \to +\infty$) асимптотическим границам ударной волны.

Покомпонентное сохранение (для каждого «i») потока массы

$$<m_i c_x f_i^-(\vec{c})> \ = \ <m_i c_x f_i^+(\vec{c})> \quad (3.3.4)$$

Сохранение суммарного потока импульсов компонентов смеси

$$<\sum_{i=1}^{N} m_i {c_x}^2 f_i^-(\vec{c})> \ = \ <\sum_{i=1}^{N} m_i {c_x}^2 f_i^+(\vec{c})> \quad (3.3.5)$$

Сохранение суммарного потока энергии компонентов смеси

$$< \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{m_i \ \ c^2}{2} \ \ + E_i \right) c_x f_i^-(\vec{c}) > \ \ =$$

$$= \ < \sum_{i=1}^{N} \ \left(\frac{m_i \ \ c^2}{2} \ \ + E_i \right) c_x \, f_i^+(\vec{c}) > \qquad (3.3.6)$$

Проследим, какие изменения произойдут при учёте равенств (3.3.4) – (3.3.6) в правых частях формул (3.1.2), (3.2.2) и (3.3.2).

Первые квадратные скобки в правых частях этих формул, умножаемые на множитель ½, содержат сумму одинаковых слагаемых. Вследствие этого первые квадратные скобки можно заменить на одно из этих слагаемых.

Во вторых и третьих квадратных скобках содержатся разности равных друг другу левых и правых частей соотношений Рэнкина – Гюгонио в смесях газов. Поэтому не равные нулю внутри ударной волны координатные множители (2.5) будут умножаться на равные нулю вторые и третьи квадратные скобки.

В силу этого законы сохранения потоков массы, импульсов и энергии при произвольном значении координаты х внутри волны будут выполняться автоматически.

Заключение

Для сильно диспергированных смесей газов рассмотрена строгая асимптотическая постановка задачи о структуре ударного фронта.

Показано, что для рэлеевской смеси газов в случае асимптотического перехода типа (1) функция распределения лёгкого компонента остаётся неизменной на всей длине релаксации тяжёлого компонента. Эта функция равна максвелловскому распределению с макроскопическими параметрами, определяемыми по соотношениям Рэнкина – Гюгонио в ударной волне с одним лёгким компонентом.

Найден асимптотический вид кинетического уравнения для релаксации тяжёлого компонента к общему состоянию поступательного равновесия с лёгким компонентом.

Таким уравнением, как оказалось, является уравнение Больцмана для одномерной ударной волны с Фоккер – Планковским оператором столкновений. Приведён явный вид этого уравнения. Для применения модифицированного метода Тамма – Мотт-Смита, сохраняющего все преимущества его исходной классической редакции, доказаны законы сохранения потоков массы, импульса и энергии при произвольном значении координаты внутри фронта ударной волны.

Статья поступила в редакцию 31.10.2023 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кузнецов М. М., Кулешова Ю. Д. Аналитическая оценка наибольшего значения эффекта высокоскоростного перехлёста в ударной волне // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2021. № 2. С. 41–51. DOI: 10.18384/2310-7251-2021-2-41-51.
2. Кузнецов М. М., Кулешова Ю. Д. Асимптотическое значение эффекта высокоскоростного перехлеста в ударной сжатой смеси газов / Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2021. № 3. С. 39–56. DOI: 10.18384/2310-7251-2021-3-39-56.
3. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.
4. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. М.: Изд-во иностранной литературы, 1960. 510 с.
5. Куликов С. В. Поступательная неравновесность трёхкомпонентного газа во фронте ударной волны // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 1997. № 4. С. 171–178.
6. Численное моделирование процессов поступательной и химической неравновесности во фронте сильной ударной волны / Горелов В. А., Комаров В. Н., Кузнецов М. М., Юмашев В. Л. // Теоретические основы химической технологии. 2003. Т. 37. № 1. С. 3–9.
7. Великодный В. Ю., Битюрин В. А. О возможности термоядерного синтеза во фронте ударной волны // Прикладная физика. 2001. № 3. С. 12–19
8. Осипов А. И. Релаксационные процессы в газах.1.Неравновесное распределение энергии по поступательным степеням свободы // Физика горения и взрыва. 1966. Т. 2. № 4. С. 42–61.
9. Черченьяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана. М.: Мир, 1978. 496 с.
10. Ахиезер А. И., Пелетминский С. В. Методы статистической физики. М.: Наука, 1997. 367 с.
11. Митчнер М., Кругер Ч. Частично ионизованные газы. М.: Мир, 1976. 496 с.
12. Галкин В. С., Макашев Н. К. Условия применимости и молекулярно-кинетический вывод уравнений многотемпературной многоскоростной газодинамики // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1983. Т. 23. № 6. С. 1443–1453.
13. Samuel Tanenbaum B., MacDonald Scott R. Comments on “Kinetic-Theory Approach to the Problem of Shock-Wave Structure in a Binary Mixture” // Physics of Fluids. 1966. Vol. 9. Iss. 5. P. 1048–1049. DOI: 10.1063/1.1761772.
14. Bratos M., Herczynski R. Shock waves in noble gases and their mixtures // Archives of Mechanics (Archiwum Mechaniki Stosowanej). 1983. Vol. 35. No. 2. P. 215–239.
15. Oberai M. M. Kinetic-Theory Approach to the Problem of Shock-Wave Structure in a Binary Mixture // Physics of Fluids. 1965. Vol. 8. P. 826–833. DOI: 10.1063/1.1761326.
16. Fujimoto T. Shock-Wave Structure in Binary Gas Mixtures with No Chemical Reaction // Rarefied Gas Dynamics. Vol. 1. Proceedings of the Fourth International Symposium held at the Institute for Aerospace Studies (Toronto, 1964) / ed. by J. H. de Leeuw. New York: Academic Press, 1965. P. 223–239.

REFERENCES

1. Kuznetsov M. M., Kuleshova Yu. D. [Analytical estimation of the highest value of the effect of high-speed overshoot in a shock wave]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-Matematika* [Bulletin of the

Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics], 2021, no. 2, pp. 41–51. DOI: 10.18384/2310-7251-2021-2-41-51.
2. Kuznetsov M. M., Kuleshova Yu. D. [The asymptotic high-speed overshoot effect value in shock-compressed gas mixture]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-Matematika* [Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics], 2021, no. 3, pp. 39–56. DOI: 10.18384/2310-7251-2021-3-39-56.
3. Kogan M. N. *Dinamika razrezhennogo gaza* [Dynamics of rarefied gas]. Moscow, Nauka Publ., 1967. 440 p.
4. Chapmen S., Cowling T. *Matematicheskaya teoriya neodnorodnykh gazov* [The Mathematical Theory of Non-uniform Gases]. Moscow, Izdatelstvo inostrannoy literatury Publ., 1960. 510 p.
5. Kulikov S. V. [Translational nonequilibrium of a three-component gas in the front of a shock wave]. In*: Izvestiya Rossiyskoy akademii nauk. Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid Dynamics. A Journal of Russian academy of Sciences], 1997, no. 4, pp. 171–178.
6. Gorelov V. A., Komarov V. N., Kuznetsov M. M., Yumashev V. L. [Numerical modeling of the translational and chemical disequilibria in the front of a strong shock wave]. In: *Teoreticheskiye osnovy khimicheskoy tekhnologii* [Theoretical Foundations of Chemical Engineering], 2003, vol. 37, no. 1, pp. 3–9.
7. Velikodny V. Yu., Bityurin V. A. [About possibility of thermonuclear synthesis in a shock wave front]. In: *Prikladnaya fizika* [Applied Physics], 2001, no. 3, pp. 12–19.
8. Osipov A. I. [Relaxation processes in gases. 1. Nonequilibrium distribution of energy over translational degrees of freedom]. In: *Fizika goreniya i vzryva* [Combustion, Explosion and Shock Waves], 1966, vol. 2, no. 4, pp. 42–61.
9. Cherchenyani K. *Teoriya i prilozheniya uravneniya Boltsmana* [Theory and applications of the Boltzmann equatiom]. Moscow, Mir Publ., 1978. 496 p.
10. Akhiezer A. I., Peletminsky S. V. *Metody statisticheskoy fiziki* [Methods of statistical physics]. Moscow, Nauka Publ., 1997. 367 p.
11. Mitchner M., Kruger C. *Chastichno ionizovannyye gazy* [Partially ionized gases]. Moscow, Mir Publ., 1976. 496 p.
12. Galkin V. S., Makashev N. K. [Conditions for the applicability and molecular-kinetic derivation of the equations of multitemperature multivelocity gas dynamics]. In: *Zhurnal vychislitelnoy matematiki i matematicheskoy fiziki* [USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics], 1983, T. 23, no. 6, pp. 1443–1453.
13. Samuel Tanenbaum B., MacDonald Scott R. Comments on “Kinetic-Theory Approach to the Problem of Shock-Wave Structure in a Binary Mixture”. In: *Physics of Fluids*, 1966, vol. 9, iss. 5, pp. 1048–1049. DOI: 10.1063/1.1761772.
14. Bratos M., Herczynski R. Shock waves in noble gases and their mixtures. In: *Archives of Mechanics (Archiwum Mechaniki Stosowanej)*, 1983, vol. 35, no. 2, pp. 215–239.
15. Oberai M. M. Kinetic-Theory Approach to the Problem of Shock-Wave Structure in a Binary Mixture. In: *Physics of Fluids*, 1965, vol. 8, pp. 826–833. DOI: 10.1063/1.1761326.
16. Fujimoto T. Shock-Wave Structure in Binary Gas Mixtures with No Chemical Reaction. In: de Leeuw J. H., ed. *Rarefied Gas Dynamics. Vol. 1. Proceedings of the Fourth International Symposium held at the Institute for Aerospace Studies (Toronto, 1964)*. New York, Academic Press, 1965, pp. 223–239.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Кузнецов Михаил Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения;
e-mail: kuznets-omn@yandex.ru;

Кузнецов Глеб Витальевич – аспирант кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения;
e-mail: GlebWOW7@yandex.ru;

Паренкина Виктория Игоревна – старший преподаватель кафедры 916 «Математика» Московского авиационного института (национального исследовательского университета);
e-mail: parjonkinavi@mail.ru;

Сатюков Дмитрий Геннадьевич – аспирант кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения;
e-mail: dsatyukov@gmail.com;

Халиков Руслан Фанусович – аспирант кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения;
e-mail: Rustek95@gmail.com.

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Mihail M. Kuznetsov – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education;
e-mail: kuznets-omn@yandex.ru;

Gleb V. Kuznetsov – Postgraduate Student, Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education;
e-mail: GlebWOW7@yandex.ru;

Viktorya I. Parenkina – Senior Lecturer, Department 916 “Mathematics” Moscow Aviation Institute (National Research University);
e-mail: parjonkinavi@mail.ru;

Dmitry G. Satyukov – Postgraduate Student, Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education;
e-mail: dsatyukov@gmail.com;

Ruslan F. Halikov – Postgraduate Student, Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education;
e-mail: Rustek95@gmail.com.

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Аналитические модели поступательно неравновесной динамики ударно-сжатых бинарных смесей газов / Кузнецов М. М., Кузнецов Г. В., Паренкина В. И., Сатюков Д. Г., Халиков Р. Ф. // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2023. № 4. С. 36–48.
DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-34-48

FOR CITATION

Kuznetsov M. M., Kuznetsov G. V., Parenkina V. I., Satyukov D. G., Halikov R. F. Analytical models of translationally nonequilibrium dynamics of shock-compressed binary gas mixtures. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2023, no. 4, pp. 36–48.
DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-34-48

УДК 577.3, 573.7, 549.212
DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-49-63

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ РАСЧЁТЫ АДСОРБЦИИ И ПОДВИЖНОСТИ БИОМОЛЕКУЛ НА ПОВЕРХНОСТИ ГРАФЕНОВЫХ ПОДЛОЖЕК

Терешкин Э. В., Терешкина К. Б., Крупянский Ю. Ф.

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук
119991, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4, Российская Федерация

Аннотация
Цель. Выявить различия в динамике дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК) и стабилизирующего её белка на поверхности графена, оксида графена и в растворе.
Процедура. Методом молекулярной динамики в полноатомном приближении проведены расчёты ДНК, связанной с ДНК-стабилизирующим белком DPS (DNA-binding protein from starved cells) на поверхности графена, оксида графена и в растворе.
Результаты. На основе проведённых исследований показано, что графеновые подложки могут оказывать влияние на динамику белков и ДНК. В частности, могут ограничивать подвижность свободных областей белка, затрудняя их взаимодействие с другими молекулами, и адсорбировать молекулы ДНК, изменяя структуру комплексов DPS – ДНК.
Теоретическая и/или практическая значимость. Полученные данные представляют практический интерес для исследователей структуры биологических молекул и их комплексов на поверхности графеновых подложек. Также данные могут быть использованы при создании основанных на биологических молекулах наноматериалов с заданными свойствами.
Ключевые слова: взаимодействие белков с графеном, взаимодействие ДНК с белком и графеном, графен, оксид графена, бактериальный белок DPS, моделирование биологических молекул на графене, молекулярная динамика
Благодарности: Расчёты проводились на высокопроизводительной вычислительной системе МВС-10П в Межведомственном суперкомпьютерном центре Российской академии наук (МСЦ РАН). Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (Тема FFZE-2022-0011, № 122040400089-6)

MOLECULAR DYNAMIC OF THE ADSORPTION AND MOBILITY OF BIOMOLECULES ON GRAPHENE SHEETS

E. Tereshkin, K. Tereshkina, Y. Krupyanskii

N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences ulitsa Kosygina 4, Moscow 119991, Russian Federation

Abstract

Aim. To reveal the differences in the dynamics of deoxyribonucleic acid (DNA) and its stabilizing protein on the surface of graphene, graphene oxide and in solution.

Methodology. Using the method of molecular dynamics in the all atom approximation, calculations of DNA bound to the DNA-stabilizing protein DPS (DNA-binding protein from starved cells) on the surface of graphene, graphene oxide and in solution were carried out.

Results. Based on the studies performed, it was shown that graphene substrates can affect the dynamics of proteins and DNA. In particular, they can limit the mobility of free protein regions, hindering their interaction with other molecules, and adsorb DNA, changing the structure of DPS – DNA complexes.

Research implications. The obtained data are of practical interest for researchers of the structure of biological molecules and their complexes on the surface of graphene substrates. Also, the data can be used to create bioinspired nanomaterials with desired properties.

Keywords: interaction of proteins with graphene, interaction of DNA with protein and graphene, graphene, graphene oxide, DPS bacterial protein, simulation of biological molecules on graphene, molecular dynamics

Acknowledgments: The computations were carried out on MVS-10P at Joint Supercomputer Center of the Russian Academy of Sciences (JSCC RAS). This work was supported within frameworks of the state task for FRC CP RAS FFZE-2022-0011 (state registration No 122040400089-6)

Введение

В последнее время использование биологических полимеров и биомиметических молекул в качестве наноустройств привлекает всё большее внимание [1; 2]. Производство биологических молекул не требует больших затрат энергии и не загрязняет окружающую среду, поэтому может использоваться в различных областях [3]. Белковые молекулы представляют особый интерес благодаря биологической самосборке, которая обеспечивает чётко определённые функции и однородность структуры белка. Белковые наноматериалы находят себе всё более широкое применение [4]. Их выгодное преимущество заключается в сочетании наноразмеров, обеспечивающих особую форму и химическую активность, с физико-химическими свойствами, функциональной активностью отдельных белковых молекул и морфологией материала в целом, его механическими свойствами, способностью функционировать подобно природным материалам.

Таким образом, необходимые в той или иной области свойства белков можно использовать в наноструктурах. В свою очередь белки всё чаще находят применение и как инструмент в углеродных наноструктурированных материалах [5; 6]. В последние десятилетия обнаружены и синтезированы многочисленные новые формы углеродных наноматериалов, которые являются перспективными для многих отраслей наноиндустрии, так как обладают уникальными электронными, электромагнитными, термическими, оптическими и сорбционными свойствами. В частности, углеродные подложки применяется в современных микроскопических исследованиях (просвечивающая электронная микроскопия, атомно-силовая микроскопия и др.) при изучении биологических объектов.

В данной работе проведены исследования конформационной подвижности ферритиноподобного ДНК-связывающего белка DPS (DNA-binding protein from starved cells) бактерии кишечной палочки (Escherichia coli, E. coli) в свободном состоянии и в комплексе с ДНК на поверхности графена и оксида графена. Выбор данного белка обусловлен богатыми биологическими функциями, благодаря которым он обеспечивает выживание бактериальных клеток в критических условиях [7], и богатыми перспективами использования этого белка как наноматериала [8].

DPS – одни из важнейших белков для отделения ядовитых для живой клетки ионов Fe^{2+} и поддержания структуры ДНК бактерий в условиях стресса [7; 9; 10]. DPS относят к семейству ферритинов – белков, способных окислять и накапливать ионы железа в своей полости, также они играют важную роль в защите клетки от активных форм кислорода, предохраняя клетки от окислительного стресса. Белок DPS является гомододекамером, т. е. состоит из 12 идентичных субъединиц. Последовательность аминокислот в субъединицах различается для разных видов бактерий. Додекамер DPS представляет собой наноконтейнер шаровидной формы, с внешним диаметром около 9 нм и внутренним 5 нм. Полость внутри способна вместить до 500 ионов Fe^{3+}, которые хранятся в форме ферригидрита $5Fe_2O_3 \cdot 9H_2O$, прикреплённого к стенке белка. Для высвобождения железа, оно переводится из Fe(III) в Fe(II). Как было отмечено, DPS принадлежат к семейству ферритиновых белков и, подобно накапливающим железо белкам ферритинам, неорганическое ядро DPS можно изменить на магнитное (магнетит или маггемит) in vitro с образованием искусственного магнитного белка – магнето-DPS [11].

В фазе роста бактериальной колонии содержание белка DPS составляет около 6 тыс. белков на клетку, тогда как в стационарной фазе развития бактериальной колонии, когда снижается содержание питательных веществ, бактерии начинают вырабатывать этот белок в количестве до 200 тыс. молекул на клетку. Защитное действие белка проявляется в отношении стресса голодания, окислительного и теплового стрессов, воздействия ультрафиолетового и γ-излучения, токсичных ионов металлов, кислот, антибиотиков [12–15]. За возможность связывания ДНК отвечают в первую очередь концевые аминокислотные остатки белка каждой из 12 субъединиц. У бактерии *E. coli* это первые двадцать чрезвычайно подвижных N-концевых аминокислотных остатков, богатых лизинами [16]. В исследованиях *in vivo* [17; 18], *in vitro* [19] и *in silico* [20] получены данные по трёхмерной структуре белка DPS, его кристаллов и возможным механизмам взаимодействия с ДНК. В области практического применения белок DPS [8; 21] и его гомологи [11; 22] также активно изучаются.

В данной работе методами классической молекулярной динамики в полноатомном приближении исследованы процессы адсорбции и конформационная подвижность указанных биополимеров (белка DPS, ДНК) на интерфейсе белок-графен. Рассмотрены подложки из графена и невосстановленного оксида графена, содержащего 20% кислородсодержащих функциональных групп.

Найдены и изучены структурные и энергетические характеристики исследованных систем. Определена возможность нековалентного связывания исследованных молекул с поверхностью наноматериала. Обнаружено, что белковые молекулы подвижными концами способны образовывать прочные нековалентные взаимодействия, изменяющие функционально-динамическое поведение белков.

Материалы и методы

Исследованы полноатомные модели систем графена, оксида графена, ДНК-связывающего белка DPS бактерии *Escherichia coli* и участка ДНК (25 пар нуклеотидов) в B-форме.

Парциальные заряды и энергетические характеристики моделей графена находились путём квантово-механического моделирования участков графена гексагональной формы, содержащих 96 атомов углерода с замыканием нескомпенсированных валентностей атомами водорода. В моделях оксида графена добавлялись кислородсодержащие группы согласно данным твердотельной спектроскопии ЯМР [23]. Квантово-механическое моделирование осуществлялось в программе FIREFLY 8.2.0[1] методом Хартри – Фока с разложением молекулярных орбиталей по базису 6–311++G(d,p). Для аппроксимации электростатического потенциала с целью нахождения парциальных зарядов на атомах графена и оксида графена использован алгоритм GEODESIC.

При параметризации парциальных зарядов и построении молекулярно-динамических моделей графена и его оксидов, во избежание влияния краевых эффектов, учитывались 54 атома углерода, находящиеся в средней части листа, а также связанные с ними кислородсодержащие группы (рис. 1). Это соединение рассматривалось как элементарный остаток графена или оксида графена. Параметризация проводилась для полноатомного силового поля AMBER99–PARMBSC1. Каждый из остатков моделировался электрически нейтральным. В молекулярном редакторе собирался лист графена, содержащий

[1] См.: Granovsky A. A. Firefly version 8 [Электронный ресурс]. URL: http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html (дата обращения: 02.02.2023).

192 остатка. Атомы углерода между ближайшими остатками связывались с помощью вспомогательной программы. Размер листа выбирался достаточным для размещения белка DPS с ДНК в гексагональной периодической расчётной ячейке.

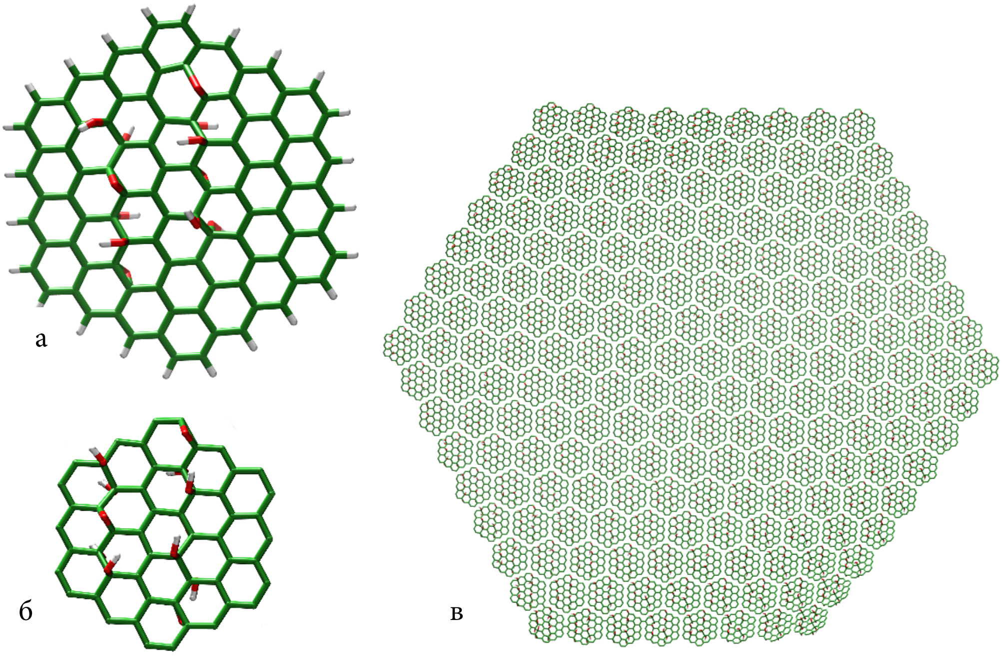


Рис. 1 / Fig. 1. ***а*** – Участок оксида графена для квантово-механических расчётов, содержащий 96 атомов углерода; ***б*** – вырезанный из структуры (а) остаток оксида графена, содержащий 54 атома углерода – элементарная единица в молекулярно-динамическом моделировании; ***в*** – составленный из 192 остатков (б) лист окисленного графена. Зелёный – атомы C, красный – O, серый –H / ***а*** – Graphene oxide section for quantum mechanical calculations, containing 96 carbon atoms; ***б*** – graphene oxide residue cut from the structure (a), containing 54 carbon atoms – an elementary unit in molecular dynamics modeling; ***в*** – composed of 192 residues (б) oxidized 5rapheme sheet. Green are carbon atoms, red is oxygen, gray is hydrogen.

Источник: по данным авторов

Состав изучаемых систем представлен в табл. 1. В начальный момент времени все основные составляющие системы (графен, белок, ДНК) не взаимодействовали друг с другом напрямую. Перед расчётом динамики проводилась минимизация энергии методом наискорейшего спуска и релаксация систем при постоянном объёме, затем при постоянном давлении в течение 0.2 нс.

Таблица 1 / Table 1

Состав молекулярно-динамических систем / Composition of molecular dynamic systems*

Номер системы	Графен	DPS	ДНК	Вода SPC/E	Ионы				
					Na^+	Cl^-	K^+	Mg^{2+}	Ca^{2+}
1	192 G	1	1	128682	561	579	106	1	3
2	192 GO	1	1	127563	561	579	106	1	3
3	192 G	1	–	132233	537	603	106	1	3
4	192 GO	1	–	131387	537	603	106	1	3
5	–	1	1	90196	408	393	75	1	2

*Указан тип молекулы графена: G – графен, GO – оксид графена. Приведено число остатков графена 75C, молекул белка DPS, ДНК и воды, а также количество ионов / The type of graphene molecule is indicated: G – graphene, GO – graphene oxide. The number of grapheme 75C residues, DPS proteins, DNA, and water molecules, as well as the number of ions, are given

Источник: по данным авторов

Расчёты молекулярной динамики проводились в полноатомном приближении в периодических ячейках с использованием программного комплекса Gromacs [24] в соответствии с ранее разработанным протоколом [16]. Для поддержания постоянной температуры 310 K использован стохастический (ланжевеновский) термостат (1) с постоянной трения 0.5 пс$^{-1}$.

$$m_i \frac{d^2\boldsymbol{r}_i}{dt^2} = -m_i\gamma_i \frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt} + \boldsymbol{F}_i(\boldsymbol{r}) + \dot{\boldsymbol{r}}_i \quad (1)$$

Здесь m_i – масса атома, F_i – действующая на атом сила, γ_i (1/пс) – ланжевеновский коэффициент трения, $\dot{\boldsymbol{r}}_i$ – случайная сила.

Амплитуда случайной силы и силы трения связаны по флуктуационно-диссипативной теореме (2), где k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура. s – временной интервал, $\delta(s)$ и δ_{ij} – дельта-функция Дирака.

$$\langle \dot{r}_i(t)\dot{r}_j(t+s)\rangle = 2m_i\gamma_i k_B T\delta(s)\delta_{ij} \quad (2)$$

Баростат Парринелло – Рамана поддерживал давление 1 атм. (постоянная времени 2 пс) изотропным способом. Взаимодействия ковалентно связанных и ближних атомов рассчитывались на каждом временном шаге. Учёт электростатических взаимодействий на больших расстояниях проводился по методу Эвальда (PME). Радиусы обрезания для всех типов взаимодействия брались равными 1.5 нм. Список соседей поддерживался с помощью схемы отсечки Верле и обновлялся каждые 10 фс. Быстрые степени свободы ограничивались с помощью алгоритма LINCS. Шаг интегрирования составлял 2 фс, длина траекторий 0.25–0.5 мкс.

Результаты

В результате расчётов было показано, что белок адсорбируется на поверхность графена и его оксида. Происходит связывание N-концевых участков белка с поверхностью. На рис. 2 показан остов белка DPS (оранжевый) и траектории движения N-концов (от красного цвета до синего) при адсорбции белка. Из 12 концевых участков белка 4 оказываются нековалентно, но прочно связанными с поверхностью графена и оксида графена, поэтому не могут принимать участие в связывании других молекул.

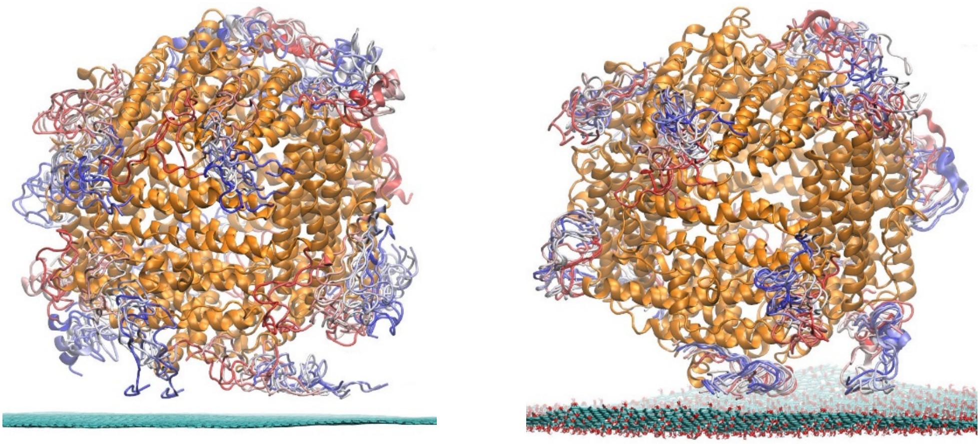


Рис. 2 / Fig. 2. Молекула DPS на графене (слева) и оксиде графена (справа). Цветом показаны положения N-концевых участков на протяжении траектории от красного (начальное положение) до синего (конечное положение) / DPS molecule on graphene (left) and graphene oxide (right). The colors show the positions of the N-terminals along the trajectory from red (start position) to blue (end position).

Источник: по данным авторов

Структура белка DPS оказывается значительно стабильнее на подложке из неокисленного графена (рис. 3, слева). В то время как на оксиде графена белок претерпевает структурные перестройки (рис. 3, справа) – меняется симметричность белка, т. е. расположение субъединиц внутри додекамера. Тем не менее на структуру комплексов DPS – ДНК оказывает большее влияние неокисленныей графен. Оксид графена притягивает ДНК, однако, её подвижность снижается не так сильно, как у поверхности неокисленного графена. Высота пика ДНК у поверхности графена (зелёные кривые на рис. 3) в 1,38 раза больше, а полуширина в 1,43 раза меньше, чем для оксида графена. Графеновые подложки практически не влияют на распределение ионов магния и кальция у комплексов DPS – ДНК. Наблюдается относительное повышение концентрации ионов натрия и калия между графеном и ДНК, а также заметное повышение концентрации ионов хлора между оксидом графена и ДНК.

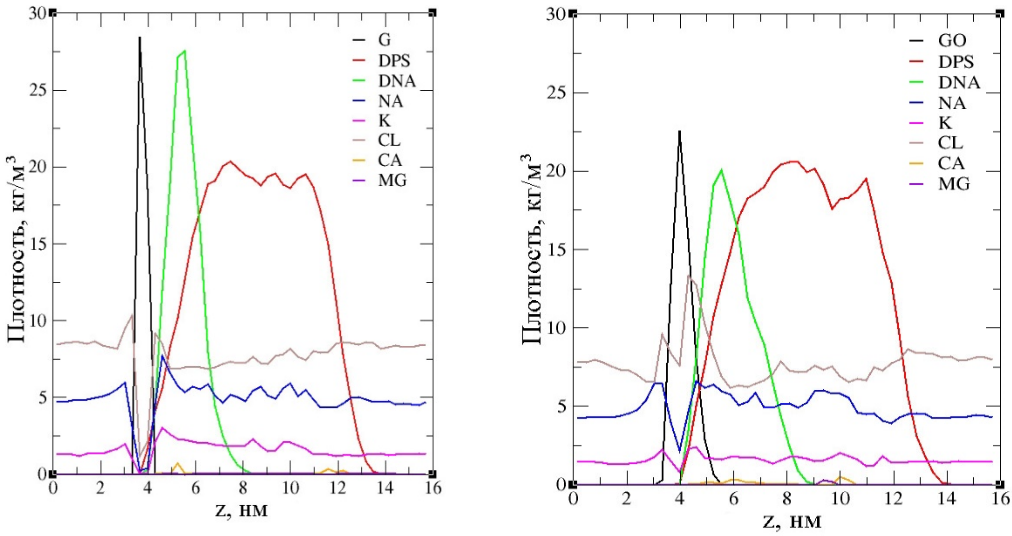


Рис. 3 / Fig. 3. Относительная плотность распределения (по массе) атомов графена (G), оксида графена (GO), белка (DPS), ДНК (DNA); ионов натрия (NA), калия (K), хлора (CL), кальция (CA) и магния (MG) внутри расчётной ячейки по оси z (нормаль к плоскости графена). Система ДНК – молекула DPS на графене (слева) и оксиде графена (справа). Проведено суммирование по траектории за 100 нс / Partial mass density of atoms for grapheme (G), graphene oxide (GO), protein (DPS), DNA; sodium (NA), potassium (K), chlorine (CL), calcium (CA), and magnesium (MG) ions inside the periodic box along the z axis (normal to the graphene plane). The DNA – DPS clusters on graphene (left) and graphene oxide (right) are shown. The summation was carried out along the trajectory for 100 ns

Источник: по данным авторов

Расчёты показывают, что комплексы DPS – ДНК образуются на графеновых подложках обеих типов (рис. 4). Однако, в отличие от стабильных комплексов в растворе, они менее стабилизированы. Минимальные расстояния от ДНК до DPS изменяются от минимального значения 0.18–0.19 нм до 0.5–1.5 нм (красная и оранжевая кривые), в то время как для комплексов в воде характерно расстояние 0.17 нм. В то же время видно, что и DPS (зелёная и серая кривые), и ДНК (чёрная и синяя кривые) адсорбируются на подложках обеих типов и образуют стабильные комплексы графен-DPS и графен-ДНК. Это свидетельствует, что графен и оксид графена являются хорошими подложками для белка и ДНК, но не ДНК-белковых комплексов.

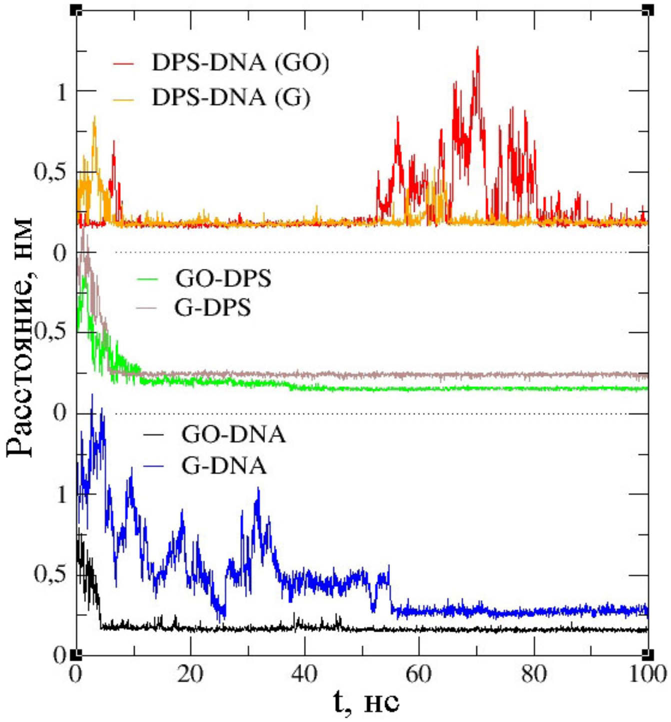


Рис. 4 / Fig. 4. Минимальное расстояние между молекулами графена (G), оксида графена (GO), белка (DPS) и ДНК (DNA) в зависимости от времени расчёта / The minimum distance between grapheme (G), graphene oxide (GO), protein (DPS) and DNA molecules depending on the simulation time.

Источник: по данным авторов

Для определения термодинамических характеристик связывания ДНК с молекулами белка DPS был применён метод поиска линейной энергии взаимодействия (LIE). Метод основан на рассмотрении потенциальной энергии взаимодействия искомой молекулы (в данной работе – ДНК) с окружающими молекулами в двух расчётах систем, в которых присутствует искомая молекула в разном окружении:

$$\Delta G_{bind} = \beta\left(\langle U^{el}_{DNA-all}\rangle_2 - \langle U^{el}_{DNA-all}\rangle_1\right) + \alpha\left(\langle U^{vdW}_{DNA-all}\rangle_2 - \langle U^{vdW}_{DNA-all}\rangle_1\right) \quad (1)$$

Здесь верхние индексы *el* относятся к электростатическим взаимодействиям, vdW – ван-дер-ваальсовым; α и β – эмпирические постоянные, подбираемые для каждого лиганда отдельно; в данной работе приняты α = 0.18 и β = 0.33; индекс *DNA–all* означает учёт взаимодействий ДНК с окружающими молекулами (исключаются внутримолекулярные взаимодействия внутри молекулы ДНК). Нижние индексы 1 и 2 указывают на номера систем.

В данной работе рассмотрены следующие пары систем: DPS – ДНК в воде и DPS – ДНК на графене (системы 5 и 1, табл. 1) и систем DPS – ДНК в воде и DPS – ДНК на оксиде графена (системы 5 и 2, табл. 1). Полученные согласно уравнению (1) разницы свободной энергии для ДНК: $\Delta G_{bind,5-1} = -15$ кДж/моль и $\Delta G_{bind,5-1} = -29$ кДж/моль. Таким образом, ДНК выгоднее находиться в связи с комплексом DPS – графен, нежели в комплексе только с белком. Интересен вклад в искомую энергию члена, отвечающего за энергию взаимодейтвия ДНК с DPS:

$$\Delta E_{DNA-Dps} = \beta\left(\langle U^{el}_{DNA-Dps}\rangle_2 - \langle U^{el}_{DNA-Dps}\rangle_1\right) + \alpha\left(\langle U^{vdW}_{DNA-Dps}\rangle_2 - \langle U^{vdW}_{DNA-Dps}\rangle_1\right) \quad (2)$$

Расчёты для тех же пар систем выявили следующие изменения энергии связывания молекул ДНК с белком согласно уравнению 2: повышение на 183 кДж/моль для первой пары систем и на 194 кДж/моль для второй пары систем от начального значения (для системы 1) -292 кДж/моль. То есть происходит значительное ослабление связи ДНК – DPS в присутствии графена и его оксида.

Заключение

В работе проведено исследование динамики ДНК и ДНК-связывающего белка DPS у поверхности графена и оксида графена. Показано, что оба типа молекул образуют стабильные комплексы с графеновыми подложками. Графен без кислородсодержащих групп способствует более быстрой адсорбции ДНК, нежели оксид графена. В то время как оксид графена в большей степени воздействует на комплексы ДНК с белком DPS, ослабляя связь между этими молекулами. Оба материала способствуют конформационным перестройкам комплексов DPS – ДНК и понижают их стабильность по сравнению с раствором.

Статья поступила в редакцию 12.10.2023 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lomonossoff G. P., Wege C. TMV Particles: The Journey From Fundamental Studies to Bionanotechnology Applications // Advances in Virus Research. 2018. Vol. 102. P. 149–176. DOI: 10.1016/bs.aivir.2018.06.003.
2. Hierarchically structured bioinspired nanocomposites / Nepal D., Kang S., Adstedt K. M., Kanhaiya K., Bockstaller M.R., Brinson L. C., Buehler M. J., et al. // Nature Materials. 2023. Vol. 22. No. 1. P. 18–35. DOI: 10.1038/s41563-022-01384-1.
3. Recent advancement of bioinspired nanomaterials and their applications: A review / Wu G., Hui X., Hu L., Bai Y., Rahaman A., Yang X.–F., Chen C. // Frontiers in Bioengineering and Biotechnology. 2022. Vol. 10. P. 952523. DOI: 10.3389/fbioe.2022.952523.

4. Zhang D, Wang Y. Functional Protein-Based Bioinspired Nanomaterials: From Coupled Proteins, Synthetic Approaches, Nanostructures to Applications // International Journal of Molecular Sciences. 2019. Vol. 20. No. 12. P. 3054. DOI: 10.3390/ijms20123054.
5. Temperature-Dependent Coherent Tunneling across Graphene-Ferritin Biomolecular Junctions / Gupta N. K., Karuppannan S. K., Pasula R. R., Vilan A., Martin J., Xu W., May E. M., et al. // ACS Applied Materials & Interfaces. 2022. Vol. 14. No. 39. P. 44665–44675. DOI: 10.1021/acsami.2c11263.
6. Biological Construction of Single-Walled Carbon Nanotube Electron Transfer Pathways in Dye-Sensitized Solar Cells / Inoue I., Watanabe K., Yamauchi H., Ishikawa Y., Yasueda H., Uraoka Y., Yamashita I. // ChemSusChem. 2014. Vol. 7. Iss. 10. P. 2805–2810. DOI: 10.1002/cssc.201402514.
7. The crystal structure of DPS, a ferritin homolog that binds and protects DNA / Grant R. A., Filman D. J., Finkel S. E., Kolter R., Hogle J. M. // Nature Structural & Molecular Biology. 1998. Vol. 5. No. 4. P. 294–303. DOI: 10.1038/nsb0498-294.
8. Floating gate memory with charge storage dots array formed by DPS protein modified with site–specific binding peptides / Kamitake H., Uenuma M., Okamoto N., Horita M., Ishikawa Y., Yamashita I., Uraoka Y. // Nanotechnology. 2015. Vol. 26. No. 19. P. 195201. DOI: 10.1088/0957-4484/26/19/195201.
9. Orban K., Finkel S. E. Dps is a Universally Conserved Dual-Action DNA-Binding and Ferritin Protein // Journal of Bacteriology. 2022. Vol. 204. No. 5. e0003622. DOI: 10.1128/jb.00036-22.
10. Possible Mechanisms of 4-Hexylresorcinol Influence on DNA and DNA-DPS Nanocrystals Affecting Stress Sustainability of *Escherichia coli* / Tereshkin E. V., Loiko N. G., Tereshkina K. B., Kovalenko V. V., Krupyanskii Y. F. // Russian Journal of Physical Chemistry B: Focus on Physics. 2022. Vol. 16. No. 4. P. 726–737. DOI: 10.1134/S1990793122040285.
11. Yamashita I. Biological path for functional nanostructure fabrication and nanodevices // Surface Innovations. 2016. Vol. 4. Iss. 3. P. 111–120. DOI: 10.1680/jsuin.16.00015.
12. Abbondanzieri E. A., Meyer A. S. More than just a phase: the search for membraneless organelles in the bacterial cytoplasm // Current Genetics. 2019. Vol. 65. P. 691–694. DOI: 10.1007/s00294-018-00927-x.
13. Calhoun L., Kwon Y. Structure, function and regulation of the DNA-binding protein DPS and its role in acid and oxidative stress resistance in Escherichia coli: a review // Journal of Applied Microbiology. 2011. Vol. 110. Iss. 2. P. 375–386. DOI: 10.1111/j.1365-2672.2010.04890.x.
14. Battesti A., Majdalani N., Gottesman S. The RpoS-mediated general stress response in *Escherichia coli* // Annual Review of Microbiology. 2011. Vol. 65. P. 189–213. DOI: 10.1146/annurev-micro-090110-102946.
15. Algu K., Choi V. S. C., Dhami R. S., Duncan D. A. K. DPS confers protection of DNA sequence integrity in UV-irradiated Escherichia coli // Journal of Experimental Microbiology and Immunology (JEMI). 2007. Vol. 11. P. 60–65.
16. Interaction of deoxyribonucleic acid with deoxyribonucleic acid-binding protein from starved cells: cluster formation and crystal growing as a model of initial stages of nucleoid biocrystallization / Tereshkin E., Tereshkina K., Loiko N., Chulichkov A., Kovalenko V., Krupyanskii Yu. // Journal of Biomolecular Structure and Dynamics. 2019. Vol. 37. Iss. 10. P. 2600–2607. DOI: 10.1080/07391102.2018.1492458.
17. Morphological peculiarities of the DNA-protein complexes in starved Escherichia coli cells / Loiko N., Danilova Y., Moiseenko A., Kovalenko V., Tereshkina K., Tutukina M.,

El-Registan G., Sokolova O., Krupyanskii Y. // PLoS One. 2020. Vol. 15(10): e0231562. DOI: 10.1371/journal.pone.0231562.
18. Multi-crystal data collection using synchrotron radiation as exemplified with low-symmetry crystals of Dps / Kovalenko V., Popov A., Santoni G., Loiko N., Tereshkina K., Tereshkin E., Krupyanskii Y. // Acta Crystallographica Section F. Structural Biology Communications. 2020. Vol. 76. Iss. 11. P. 568–576. DOI: 10.1107/S2053230X20012571.
19. Projection structures reveal the position of the DNA within DNA-Dps Co-crystals / Moiseenko A., Loiko N., Tereshkina K., Danilova Y., Kovalenko V., Chertkov O., Feofanov A. V., Krupyanskii Y. F., Sokolova O. S. // Biochem Biochemical and Biophysical Research Communications. 2019. Vol. 517. Iss. 3. P. 463–469. DOI: 10.1016/j.bbrc.2019.07.103.
20. Tereshkin E. V., Tereshkina K. B., Krupyanskii Yu. F. Predicting Binding Free Energies for DPS Protein-DNA complexes and Crystals Using Molecular Dynamics // Supercomputing Frontiers and Innovations. 2022. Vol. 9. No. 2. Special Issue on Supercomputing in Computational Biology and Molecular Modeling of Living Systems. P. 33–45. DOI: 10.14529/jsfi220203.
21. Synthesis of Iron Oxide Nanoparticles in Listeria innocua Dps (DNA-binding Protein from Starved Cells): a study with the wild-type protein and a catalytic centre mutant / Ceci P., Chiancone E., Kasyutich O., Bellapadrona G., Castelli L., Fittipaldi M., Sangregorio C., Innocenti C., Gatteschi D. // Chemistry – A European Journal. 2010. Vol. 16. Iss. 2. P. 709–717. DOI: 10.1002/chem.200901138.
22. Bacterioferritin nanocage: Structure, biological function, catalytic mechanism, self-assembly and potential applications / Guo M., Gao M., Liu J., Xu N., Wang H. // Biotechnology Advances. 2022. Vol. 61. P. 108057. DOI: 10.1016/j.biotechadv.2022.108057.
23. NMR-based structural modeling of graphite oxide using multidimensional ^{13}C solid-state NMR and ab initio chemical shift calculations / Casabianca L. B., Shaibat M. A., Cai W. W., Park S., Piner R., Ruoff R. S., Ishii Y. // Journal of the American Chemical Society. 2010. Vol. 132. No. 16. P. 5672–5676. DOI: 10.1021/ja9030243.
24. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers / Abraham M. J., Murtola T., Schulz R., Páll S., Smith J. C., Hess B., Lindahl E. // SoftwareX. 2015. Vol. 1–2. P. 19–25. DOI: 10.1016/j.softx.2015.06.001.

REFERENCES

1. Lomonossoff G. P., Wege C. TMV Particles: The Journey From Fundamental Studies to Bionanotechnology Applications. In: *Advances in Virus Research*, 2018, vol. 102, pp. 149–176. DOI: 10.1016/bs.aivir.2018.06.003.
2. Nepal D., Kang S., Adstedt K. M., Kanhaiya K., Bockstaller M.R., Brinson L. C., Buehler M. J., et al. Hierarchically structured bioinspired nanocomposites. In: *Nature Materials*, 2023, vol. 22, no. 1, pp. 18–35. DOI: 10.1038/s41563-022-01384-1.
3. Wu G., Hui X., Hu L., Bai Y., Rahaman A., Yang X.–F., Chen C. Recent advancement of bioinspired nanomaterials and their applications: A review. In: *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*, 2022, vol. 10, pp. 952523. DOI: 10.3389/fbioe.2022.952523.
4. Zhang D, Wang Y. Functional Protein-Based Bioinspired Nanomaterials: From Coupled Proteins, Synthetic Approaches, Nanostructures to Applications. In: *International Journal of Molecular Sciences*, 2019, vol. 20, no. 12, pp. 3054. DOI: 10.3390/ijms20123054.

5. Gupta N. K., Karuppannan S. K., Pasula R. R., Vilan A., Martin J., Xu W., May E. M., et al. Temperature-Dependent Coherent Tunneling across Graphene-Ferritin Biomolecular Junctions. In: *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2022, vol. 14, no. 39, pp. 44665–44675. DOI: 10.1021/acsami.2c11263.
6. Inoue I., Watanabe K., Yamauchi H., Ishikawa Y., Yasueda H., Uraoka Y., Yamashita I. Biological Construction of Single-Walled Carbon Nanotube Electron Transfer Pathways in Dye-Sensitized Solar Cells. In: *ChemSusChem*, 2014, vol. 7, iss. 10, pp. 2805–2810. DOI: 10.1002/cssc.201402514.
7. Grant R. A., Filman D. J., Finkel S. E., Kolter R., Hogle J. M. The crystal structure of DPS, a ferritin homolog that binds and protects DNA. In: *Nature Structural & Molecular Biology*, 1998, vol. 5, no. 4, pp. 294–303. DOI: 10.1038/nsb0498-294.
8. Kamitake H., Uenuma M., Okamoto N., Horita M., Ishikawa Y., Yamashita I., Uraoka Y. Floating gate memory with charge storage dots array formed by DPS protein modified with site–specific binding peptides. In: *Nanotechnology*, 2015, vol. 26, no. 19, pp. 195201. DOI: 10.1088/0957-4484/26/19/195201.
9. Orban K., Finkel S. E. Dps is a Universally Conserved Dual-Action DNA-Binding and Ferritin Protein. In: *Journal of Bacteriology*, 2022, vol. 204, no. 5, e0003622. DOI: 10.1128/jb.00036-22.
10. Tereshkin E. V., Loiko N. G., Tereshkina K. B., Kovalenko V. V., Krupyanskii Y. F. Possible Mechanisms of 4-Hexylresorcinol Influence on DNA and DNA-DPS Nanocrystals Affecting Stress Sustainability of *Escherichia coli*. In: *Russian Journal of Physical Chemistry B: Focus on Physics*, 2022, vol. 16, no. 4, pp. 726–737. DOI: 10.1134/S1990793122040285.
11. Yamashita I. Biological path for functional nanostructure fabrication and nanodevices. In: *Surface Innovations*, 2016, vol. 4, iss. 3, pp. 111–120. DOI: 10.1680/jsuin.16.00015.
12. Abbondanzieri E. A., Meyer A. S. More than just a phase: the search for membraneless organelles in the bacterial cytoplasm. In: *Current Genetics*, 2019, vol. 65, pp. 691–694. DOI: 10.1007/s00294-018-00927-x.
13. Calhoun L., Kwon Y. Structure, function and regulation of the DNA-binding protein DPS and its role in acid and oxidative stress resistance in Escherichia coli: a review. In: *Journal of Applied Microbiology*, 2011, vol. 110, iss. 2, pp. 375–386. DOI: 10.1111/j.1365-2672.2010.04890.x.
14. Battesti A., Majdalani N., Gottesman S. The RpoS-mediated general stress response in *Escherichia coli*. In: *Annual Review of Microbiology*, 2011, vol. 65, pp. 189–213. DOI: 10.1146/annurev-micro-090110-102946.
15. Algu K., Choi V. S. C., Dhami R. S., Duncan D. A. K. DPS confers protection of DNA sequence integrity in UV-irradiated Escherichia coli. In: *Journal of Experimental Microbiology and Immunology (JEMI)*, 2007, vol. 11. pp. 60–65.
16. Tereshkin E., Tereshkina K., Loiko N., Chulichkov A., Kovalenko V., Krupyanskii Yu. Interaction of deoxyribonucleic acid with deoxyribonucleic acid-binding protein from starved cells: cluster formation and crystal growing as a model of initial stages of nucleoid biocrystallization. In: *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 2019, vol. 37, iss. 10, pp. 2600–2607. DOI: 10.1080/07391102.2018.1492458.
17. Loiko N., Danilova Y., Moiseenko A., Kovalenko V., Tereshkina K., Tutukina M., El-Registan G., Sokolova O., Krupyanskii Y. Morphological peculiarities of the DNA-protein complexes in starved Escherichia coli cells. In: *PLoS One*, 2020, vol. 15(10): e0231562. DOI: 10.1371/journal.pone.0231562.

18. Kovalenko V., Popov A., Santoni G., Loiko N., Tereshkina K., Tereshkin E., Krupyanskii Y. Multi-crystal data collection using synchrotron radiation as exemplified with low-symmetry crystals of Dps. In: *Acta Crystallographica Section F. Structural Biology Communications*, 2020, vol. 76, iss. 11, pp. 568–576. DOI: 10.1107/S2053230X20012571.
19. Moiseenko A., Loiko N., Tereshkina K., Danilova Y., Kovalenko V., Chertkov O., Feofanov A. V., Krupyanskii Y. F., Sokolova O. S. Projection structures reveal the position of the DNA within DNA-Dps Co-crystals. In: *Biochem Biochemical and Biophysical Research Communications*, 2019, vol. 517, iss. 3, pp. 463–469. DOI: 10.1016/j.bbrc.2019.07.103.
20. Tereshkin E. V., Tereshkina K. B., Krupyanskii Yu. F. Predicting Binding Free Energies for DPS Protein-DNA complexes and Crystals Using Molecular Dynamics. In: *Supercomputing Frontiers and Innovations*, 2022, vol. 9, no. 2. Special Issue on Supercomputing in Computational Biology and Molecular Modeling of Living Systems, pp. 33–45. DOI: 10.14529/jsfi220203.
21. Ceci P., Chiancone E., Kasyutich O., Bellapadrona G., Castelli L., Fittipaldi M., Sangregorio C., Innocenti C., Gatteschi D. Synthesis of Iron Oxide Nanoparticles in Listeria innocua Dps (DNA-binding Protein from Starved Cells): a study with the wild-type protein and a catalytic centre mutant. In: *Chemistry – A European Journal*, 2010, vol. 16, iss. 2, pp. 709–717. DOI: 10.1002/chem.200901138.
22. Guo M., Gao M., Liu J., Xu N., Wang H. Bacterioferritin nanocage: Structure, biological function, catalytic mechanism, self-assembly and potential applications. In: *Biotechnology Advances*, 2022, vol. 61, pp. 108057. DOI: 10.1016/j.biotechadv.2022.108057.
23. Casabianca L. B., Shaibat M. A., Cai W. W., Park S., Piner R., Ruoff R. S., Ishii Y. NMR-based structural modeling of graphite oxide using multidimensional ^{13}C solid-state NMR and ab initio chemical shift calculations. In: *Journal of the American Chemical Society*, 2010, vol. 132, no. 16, pp. 5672–5676. DOI: 10.1021/ja9030243.
24. Abraham M. J., Murtola T., Schulz R., Páll S., Smith J. C., Hess B., Lindahl E. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers. In: *SoftwareX*, 2015, vol. 1–2, pp. 19–25. DOI: 10.1016/j.softx.2015.06.001.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Терешкин Эдуард Владимирович – научный сотрудник отдела строения вещества Федерального исследовательского центра химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук;
e-mail: ramm@mail.ru

Терешкина Ксения Борисовна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник отдела строения вещества Федерального исследовательского центра химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук;
e-mail: ksenia.tereshkina@chph.ras.ru

Крупянский Юрий Федорович – доктор физико–математических наук, заведующий отделом строения вещества Федерального исследовательского центра химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук;
e-mail: yuriifkru@gmail.com

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Eduard V. Tereshkin – Researcher, Department of Structure of Matter, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences;
e-mail: ramm@mail.ru

Ksenia B. Tereshkina – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Department of Structure of Matter, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences;
e-mail: ksenia.tereshkina@chph.ras.ru

Yurii F. Krupyanskii – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Departmental Head, Department of Structure of Matter, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences;
e-mail: yuriifkru@gmail.com

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Терешкин Э. В., Терешкина К. Б., Крупянский Ю. Ф. Молекулярно-динамические расчёты адсорбции и подвижности биомолекул на поверхности графеновых подложек // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2023. № 4. С. 49–63.
DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-49-63

FOR CITATION

Tereshkin E. V., Tereshkina K. B., Krupyanskii Y. F. Molecular dynamic of the adsorption and mobility of biomolecules on graphene sheets. In: *Bulletin of the Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2023, no. 4, pp. 49–63.
DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-49-63

УДК 004.94
DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-64-80

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ПИКСЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ В ЗВУКОВЫЕ ОТОБРАЖЕНИЯ. Часть 1.

Ключников С. А., Калашников Е. В.

Государственный университет просвещения
141014, Московская область, г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24, Российская Федерация

Аннотация
Цель. Выявить связь между визуальным и звуковым восприятием.
Процедура и методы. При помощи объектно-ориентированного программирования (ООП) языка Python ищется способ преобразования визуального (пиксельного) отображения в звуковое отображение. Применяется ряд современных и функциональных библиотек. Используется современные способы «упаковки» всех программных компонентов в один файл для удобной развёртки программы на электронно-вычислительном устройстве (ЭВМ) с любой современной операционной системой (ОС).
Результаты. Создан программный продукт на основе современного ООП языка программирования и функциональных библиотек, позволяющий представить пиксельную структуру визуального изображения в звуковое отображение.
Теоретическая и/или практическая значимость исследования заключается в раскрытии современного способа «упаковки» всех программных компонентов в один файл для удобной развёртки программы на электронно-вычислительном устройстве (ЭВМ) с любой современной операционной системой. Это позволяет преобразовать цветовое визуальное изображение со множеством оттенков в звуковое отображение.
Ключевые слова: преобразование, программирование, Python, библиотеки, музыка, октавы, фортепиано, цветовая модель, пиксели

CONVERTING A PIXEL STRUCTURE INTO SOUND IMAGINATIONS. Part 1

S. Klyuchnikov, E. Kalashnikov

Federal State University of Education
ulitsa Very Voloshinoi 24, Mytishchi 141014, Moscow Region, Russian Federation

Abstract
Aim. To identify the connection between visual and sound perception.

Methodology. Using Object-Oriented Programming (OOP) of the Python language, we are looking for a way to convert a visual (pixel) display into an audio display. A number of modern and functional libraries are used. Modern methods of "packing" all software components into a single file are used for convenient program deployment on an electronic computing device (computer) with any modern operating system (OS).
Results. A software product based on the modern object-oriented programming language and functional libraries was created, which allows to present the pixel structure of a visual image in a sound display format.
Research implications. The significance lies in the disclosure of a modern way of "packing" all software components into a single file for convenient program deployment on an electronic computing device (computer) with any modern operating system (OS).
Keywords: Conversion, Programming, Python, libraries, music, octaves, piano, color model, pixels

Введение

Цвет и звук всегда привлекали внимание человека. Умение сочетать цвета приводит к созданию изображений. Сочетание различных звуков позволяет создавать музыкальные мелодии. И то и другое вызывает определённые эмоции человека. Более того, созерцание изображений часто вызывает звуковые (музыкальные) ассоциации. Также музыкальные (звуковые) произведения вызывают визуальные ассоциации. Такая связь не очевидна. С другой стороны, одно из направлений теоретической физики предусматривает исследования физических моделей когнитивных процессов, в которых задействованы восприятие, память, размышления, ассоциации. Для того чтобы моделировать такие сложные и плохо определённые (в математическом и физическом смысле) ситуации необходимо рассмотреть ситуации, в которых была бы возможность выразить звуковые отображения через цветовые и наоборот. Данная работа как раз и направлена на исследование такой возможной связи «цветовое изображение – звуковое изображение».

Первые попытки сопровождать изображения музыкой (тапёры) относятся ко времени создания первых немых фильмов. А первое осмысленное сочетание музыкального произведения с цветовым и световым сопровождением создал Скрябин А. Н. («Прометей (Поэма огня)» впервые со световой партией был исполнен в 1915 г. в Нью-Йорке[1]). Позже, в 20-30-х гг. прошлого века над созданием цветомузыкальных произведений работал Лев Термен. В настоящее время практически нет препятствий для создания программ, генерирующих музыкальные произведения, сочетающие музыкальное сопровождение с изображением и его движением[2]. Однако в связи визуального

[1] См.: Александр Николаевич Скрябин. «Прометей» [Электронный ресурс] // Музыкальные сезоны: [сайт]. URL: https://musicseasons.org/aleksandr-nikolaevich-skryabin-prometej/ (дата обращения: 04.06.2023).

[2] См.: Генерация музыки из изображений с помощью Python (перевод Д. Брайта) [Электронный ресурс] // Хабр : [сайт]. URL: https://habr.com/ru/companies/ruvds/articles/708890/ (дата обращения: 04.06.2023); Murcia V. Making Music From Images with Python [Электронный ресурс] // Medium : [сайт]. URL: https://medium.com/m/global-identity-2?redirectUrl=https%3A%2F%2Fbetterprogramming.pub%2Fmaking-music-from-images-with-python-81db627fd549 (дата обращения: 04.06.2023).

изображения с возможным звуковым отображением нас интересует формальная сторона взаимосвязи звукового и цветового ряда.

Действительно, существует семь основных нот и семь основных цветов. И вопрос состоит в том, чтобы выяснить, как цвет изображения отображается в звук и, наоборот, как звук может отображаться в цветовое изображение. Минимальным элементом изображения является пиксель. В связи с этим возникает задача: по любому изображению, основываясь на его пиксельной сетке, создать звуковое отображение.

1. Формирование отображения цветового изображения в звуковое поле

Для того чтобы построить схему преобразования цветовой гаммы изображения в форму, удобную для анализа изображения, необходимо выделить особенности формирования цветов с учётом восприятия цветов зрением человека [1; 2][3]. Человек, в свою очередь, должен нормально воспринимать цвета компьютерного изображения. По большей части люди трихроматы, т. е. способны воспринимать три основных цвета, заложенных в матрице всех мониторов, а именно: синий, красный и зелёный. Сетчатка человека благодаря рецепторам воспринимает длины световых волн, которые маркируются как S, M, L: S – воспринимает синий, L – красный и M – зелёный; или RGB – маркировка первых трёх букв цветов, воспринимаемым человеческой сетчаткой (см. рис. 1). Также существует RGBA, где A – это степень прозрачности цвета.

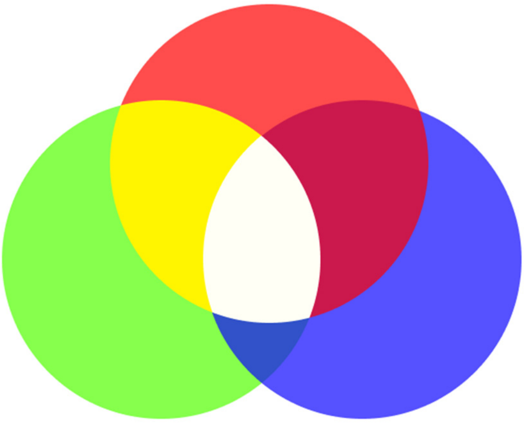


Рис. 1 / Fig. 1. Модель RGB-схемы / RGB Scheme Model

Источник: составлено авторами.

[3] Также см.: Теория цвета как основа для дизайна и иллюстрации (перевод Д. Брайта) [Электронный ресурс] // Хабр: [сайт]. URL: https://habr.com/ru/companies/ruvds/articles/553582/ (дата обращения: 04.06.2023). Далее: Теория цвета как основа для дизайна и иллюстрации // Хабр ; Color Theory: The Primer for Designers and Illustrators [Электронный ресурс] // DESIGNXPLORER: [сайт]. URL: https://designxplorer.co/color-theory-for-designers-and-illustrators/ (дата обращения: 04.06.2023). Далее: Color Theory: The Primer for Designers and Illustrators // DESIGNXPLORER.

Сложение данных трёх SML-цветов даёт различные оттенки. Также существует и аналогичная данной модели субтрактивная модель, которая маркируется как CMYK и формируется от обратного модели RGB. CMYK-модель создаётся вычитанием цвета, это её фундаментальная особенность в отличие от RGB-модели [1].

Существуют и обратные модели RGB, это BGR-модели. Данная модель является устаревшей и не удобной для восприятия текстовой составляющей, особенно на операционных системах семейства Windows. При воспроизведении изображения происходит компоновка субпикселей обратной модели из-за чего восприятие небольших деталей (текста) становится трудно читаемым. BGR-формат, благодаря своим недостаткам, очень редко встречается в современной электронной технике.

1.1. Цветовое изображение на пиксельной сетке

Цветовая модель HSV (Hue Saturation Value) также известна как «цветной круг» в любом редакторе изображений, начиная от Paint, заканчивая профессиональными специализированными программами для обработки графических изображений. Данная цветовая модель была представлена в 1978 г. Элви Реем Смитом. Модель Hue Saturation Value является нелинейным преобразованием модели RGB[4].

Модель *HSV* можно представить в виде трёхмерного объекта в цилиндрической системе координат (см. рис. 2). Полярный угол радиус-вектор *S* в данной системе координат носит значение *H*. Чтобы выбрать нужный оттенок цвета, необходимо перемещаться вдоль окружности цилиндра, яркость выбирается при помощи высоты, а для того чтобы выбрать насыщенность цвета, следует перемещаться вдоль радиуса [1][5]. Данная цветовая модель имеет как ряд преимуществ, так и недостатков, одним из них служит невозможность различить цвета, когда переменная V – яркость, приближается к оттенкам 0 (чёрный), поэтому, чтобы сгладить такие недостатки, используется каноническая модель представления HSV. В прикладном программном обеспечении модель Hue Saturation Value используется в двумерном виде, представленном в ряде современных прикладных программ, предназначенных для обработки цветовых изображений[6].

[4] См.: HSV (цветовая модель) [Электронный ресурс] // Академик : [сайт]. URL: https://dic.academic.ru/dic.nsf/ruwiki/605367 (дата обращения: 04.06.2023). Далее: HSV (цветовая модель) // Академик.

[5] Также см.: Теория цвета как основа для дизайна и иллюстрации // Хабр; Color Theory: The Primer for Designers and Illustrators // DESIGNXPLORERHSV; HSV (цветовая модель) // Академик.

[6] См.: HSV (цветовая модель) // Академик.

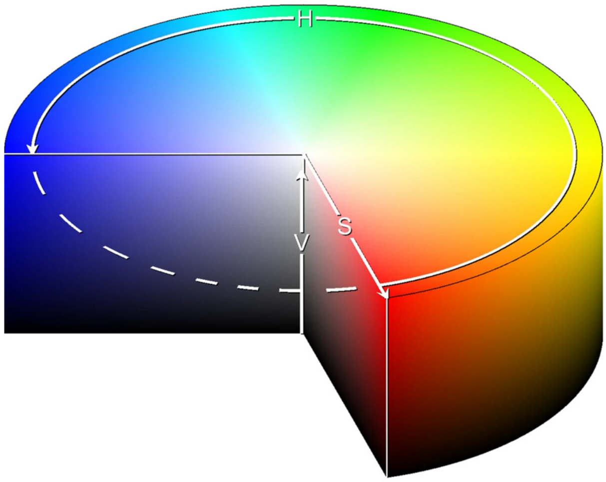


Рис. 2 / Fig. 2. Трёхмерный объект HSV в цилиндрической системе координат / Three-dimensional HSV object in a cylindrical coordinate system

Источник: HSL and HSV [Электронный ресурс] // Psychology Wiki. Fandom: [сайт]. URL: https://psychology.fandom.com/wiki/HSL_and_HSV (дата обращения: 04.06.2023).

При определении выбора цветового пространства для построения программного компонента выбрали модель цветового пространства HSV (рис. 2). Главная цель программы – определение графических примитивов на изображении. Для этого необходимо понимать, ***каким образом фильтровать цвет от всего массива изображения***. Возьмём основное известное цветовое пространство RGB (красный, зелёный, синий), рис. 1, которое в свою очередь состоит из набора трёх различных матриц, одноимённых названию трёх заглавных английских букв RGB. Для каждого пикселя в трёх матрицах существует своё собственное значение, варьирующееся от 0 до 255, данное значение показывает насыщенность или интенсивность свечения цвета. Кроме того, для обработки одного цвета придётся обрабатывать 3 различные матрицы, каждая из которых состоит из набора значений от 0 до 255. Из чего можно сделать вывод, что цветовое пространство RGB нецелесообразно использовать для обработки преобразований изображения.

Такое цветовое пространство, как HSV, позволяет удобно и интуитивно понятно работать и обрабатывать цветовые матрицы, используя только один массив данных H (см. рис. 3), который в свою очередь отвечает за все тона изображения.

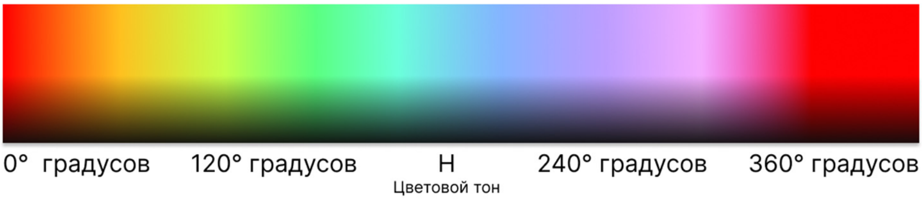


Рис. 3 / Fig. 3. Цветовое пространство HSV / HSV color space

Источник: составлено авторами.

Из рис. 3 можно сделать вывод, что основные цвета HSV носят координаты радиуса круга, а именно: оранжевый от 0° до 44°, жёлтый от 44° до 76°, зелёный от 76° до 150°, синий от 150° до 260°, фиолетовый от 260° до 320°, красный от 320° до 360°.

1.2. Формализация звукового поля

В процессе преобразования изображения в музыку важно выбрать подходящий музыкальный инструмент. По-видимому, наиболее подходящим для реализации поставленной задачи является фортепиано. Фортепиано имеет клавиши, ноты и частоты. Эталонная нота Ля первой октавы имеет базовую частоту в 440 Гц, благодаря которой происходит вся настройка звуковых инструментов, так как ориентироваться приходится именно на данную ноту. Для того чтобы отобразить полноту гармонии звуков с октавами, разделёнными на двенадцать полутонов, где в каждой следующей октаве частота основного тона выше эталонной в два раза, необходимо использовать всю наполненность частот и тонов такого музыкального инструмента, как фортепиано.

Фортепьяно имеет набор из 7 +1/4 октавы, или другими словами 88 клавиш от A0 до C8 (рис. 4). 7 +1/4 октавы означает определённый диапазон клавиш, в который входит 7 полных октав и дополнительные 1/4 октавы. Октава состоит из уникальных 12 нот, и в 7 октавах как раз есть 84 клавиши, а именно 7*12 = 84; если к 84 основным клавишам добавить 1/4 октавы, 12*1/4 =3, общее число клавиш получается 87, но стандартный музыкальный инструмент имеет 88, это связанно с A0 – субконтроктавой, которая расширяет диапазон на одну ноту вниз, нота A0 является самой низкой нотой. Таким образом, число клавиш ровняется 88 или 7 +1/4 октавы.

Все клавиши, включая чёрные и белые, представлены на рис. 4, их количество составляет 88. В программе это выражено при помощи массива «keys», в котором сохраняются необходимые значения стандартных 88 клавиш с нотациями от A0 до C8.

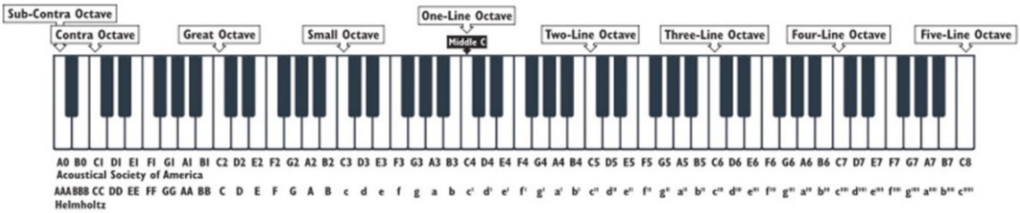


Рис. 4 / Fig. 4. Октавы на фортепиано / Octaves on the piano

Источник: [3].

1.3. Основной принцип работы функции программы на языке объектно-ориентированного программирования Python

Данная функция является фундаментальной в преобразовании пиксельной структуры кадра (изображения) в звуковое сопровождение. Работу функции программы удобно разбить на последовательность действий.

1. Задачей для написания функции является её определение при помощи def.

2. Следующим шагом необходимо создать список, в который будут входить наименование нот в октаве, таким образом:

Octave = [‘C’, ‘c’, ‘D’, ’d’, ‘E’, ‘F’, ‘f’, ‘G’, 'g', ‘A’, ‘a’, ‘B’]

3. Рассматривая вышеописанное, необходимо определить базовую частоту эталонной ноты Ля (440 Гц), для этого присвоим одноимённой переменной значение 440.

4. Определим массив при помощи библиотеки NymPy, поскольку для преобразования гармоничной музыкальной композиции необходимо перебрать и записать все возможные варианты комбинации букв из массива октав 0 до 8.

5. После создания комбинаций необходимо определить индекс первого и последнего элемента в массиве, а именно первой клавиши A0 и последней – C8.

6. Необходимо ограничить массив набором только из необходимых элементов, а именно от A0 до C8.

7. На данном этапе следует создать словарь, в котором будет происходить объединение самого словаря с ключами и значениями, которые сопоставляются с частотами нот, используя формулы 2**((n+1-49)/120) *440 [2].

1.4. Построение «словаря» соответствия нот частотам

Рассмотрим данный элемент программы подробней:

note_freqs = dict(zip(keys, [2**((n+1-49)/12)*440 for n in range(len(keys))])

Для последующего понимания этого элемента программы важно привести комментарии всех его составляющих:

(1) *range(len(keys))* формирует последовательность чисел от 0 до длины массива *keys*. Последовательность будет использована для итерационного перебора элементов массива *keys*.

(2) *((n+1-49)/12)* вычисляет значение внутри показательной функции формулы, используемой для определения частоты ноты.

(3) *(n+1-49)* представляет собой позицию текущей ноты в массиве клавиш со смещением на 1 для соответствия индексации массива.

Деление этого значения на 12 представляет собой количество полутонов, отстоящих от опорной (идеальной) ноты A4 (49 используется потому, что представляет собой позицию A4 в массиве клавиш).

(4) *2**((n+1-49)/12)*440* вычисляет частоту ноты по этому соотношению. При этом 2 возводится в степень ((n+1-49)/12) и умножается на значение 440. Это соотношение отражает связь между частотой ноты и её положением относительно опорной (идеальной) ноты A4.

(5) *[2**((n+1-49)/12)*440 for n in range(len(keys))]* – это списочное вычисление, которое выполняет итерацию по диапазону чисел, сгенерированных на шаге (1). Для каждого числа *n* вычисляется соответствующая частота по формуле из шага (3), в результате чего получается список частот.

zip(keys, [2**((n+1-49)/12)*440 for n in range(len(keys))]) объединяет массив keys со списком частот в пары (ключ, частота).

В результате создаётся последовательность кортежей, в которой каждый кортеж представляет собой клавишу фортепиано и соответствующую ей частоту.

dict(...) создаёт словарь из последовательности кортежей, сформированной на шаге 5.

Ключами словаря являются клавиши фортепиано из массива keys, а значениями – соответствующие им частоты.

Полученный словарь присваивается переменной note_freqs, в которой хранится соответствие между клавишами фортепиано и их частотами.

Таким образом, в данной строке кода с помощью комбинации вычислений, понимания списков и создания словаря формируется словарь (note_freqs), в котором клавиши фортепиано сопоставляются с соответствующими им частотами в зависимости от их положения в массиве клавиш.

Завершающими строками функции служат:

Добавление «пустого ключа» в словарь note_freqs с нулевой частотой. Данная процедура даёт возможность остановить воспроизведение звуковой композиции.

И заключительным этапом является возврат функции:

return note_freqs .

1.4.1. Пример нахождения частоты клавиши отсчёта A0

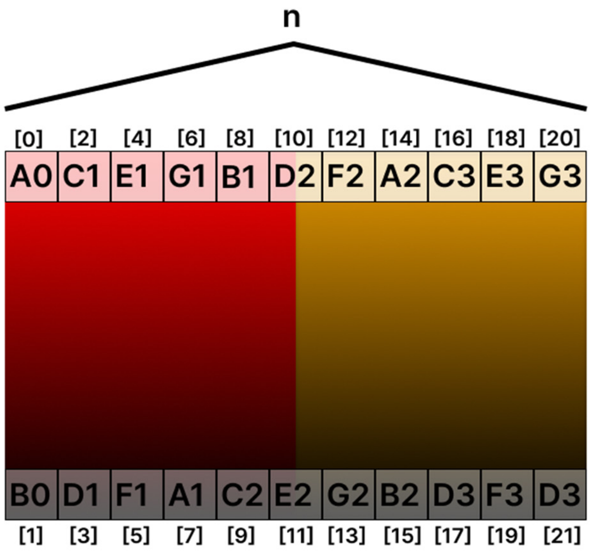


Рис. 5 / Fig. 5. Модель получения индекса частоты,
исходящая из логики работы программы /
Model for obtaining the frequency index based on the logic of the program

Источник: составлено авторами.

При помощи представленной выше формулы 2**((n+1-49)/12) *440 разберём математическое получение по индексу элемента частоты (Гц) звуковой клавиши фортепиано, рис. 5:

$2^{\frac{n+1-49}{12}} * 440$, возьмём за n первый элемент индекса [0] и вычислим частоту (Гц), а далее и звуковую клавишу фортепиано, $2^{\frac{0+1-49}{12}} * 440 = 2^{\frac{-48}{12}} * 440 = 2^{-4} * 440 = \frac{1}{2^4} * 440 = \frac{1}{16} * \frac{440}{1} = \frac{440}{16} = 27{,}5$. После проделанного решения можно получить 27,5 Гц, что эквивалентно клавише A0, и звуку ЛЯ. Первый звук для первого пикселя будет занесён в словарь, а затем проигран в звуковом сопровождении.

1.5. Частоты для нот фортепиано[7]

Номер клавиши; Нота; Английская нотация; Координатные частоты; Частота (Гц).

88	до7	C8	+43	4186,0096
87	си6	B7	+42	3951,0656
86	ля♯6 (си♭6)	A♯7/B♭7	+41	3729,3184
85	ля6	A7	+40	3520,0000
84	соль♯6 (ля♭6)	G♯7/A♭7	+39	3322,4320
83	соль6	G7	+38	3135,9680
82	фа♯6 (соль♭6)	F♯7/G♭7	+37	2959,9552
81	фа6	F7	+36	2793,8304
80	ми6	E7	+35	2637,0240
79	ре♯6 (ми♭6)	D♯7/E♭7	+34	2489,0176
78	ре6	D7	+33	2349,3184
77	до♯6 (ре♭6)	C♯7/D♭7	+32	2217,4656
76	до6	C7	+31	2093,0048
75	си5	B6	+30	1975,5328
74	ля♯5 (си♭5)	A♯6/B♭6	+29	1864,6592
73	ля5	A6	+28	1760,0000
72	соль♯5 (ля♭5)	G♯6/A♭6	+27	1661,2160
71	соль5	G6	+26	1567,9840
70	фа♯5 (соль♭5)	F♯6/G♭6	+25	1479,9776
69	фа5	F6	+24	1396,9152
68	ми5	E6	+23	1318,5120
67	ре♯5 (ми♭5)	D♯6/E♭6	+22	1244,5088
66	ре5	D6	+21	1174,6592
65	до♯5 (ре♭5)	C♯6/D♭6	+20	1108,7328
64	до5	C6	+19	1046,5024
63	си4	B5	+18	987,7664
62	ля♯4 (си♭4)	A♯5/B♭5	+17	932,3296
61	ля4	A5	+16	880,0000
60	соль♯4 (ля♭4)	G♯5/A♭5	+15	830,6080
59	соль4	G5	+14	783,9920
58	фа♯4 (соль♭4)	F♯5/G♭5	+13	739,9888
57	фа4	F5	+12	698,4576
56	ми4	E5	+11	659,2560
55	ре♯4 (ми♭4)	D♯5/E♭5	+10	622,2544
54	ре4	D5	+9	587,3296
53	до♯4 (ре♭4)	C♯5/D♭5	+8	554,3664
52	до4	C5	+7	523,2512

[7] Частоты настройки фортепиано [Электронный ресурс] // Циклопедия: [сайт]. URL: https://cyclowiki.org/wiki/Частоты_настройки_фортепиано (дата обращения: 04.06.2023).

51 си3 B4 +6 493,8832
50 ля♯3 (си♭3) A♯4/B♭4 +5 466,1648
49 ля3 A4 +4 440,0000 (является эталонной частотой ноты ля первой октавы)
48 соль♯3 (ля♭3) G♯4/A♭4 +3 415,3040
47 соль3 G4 +2 391,9960
46 фа♯3 (соль♭3) F♯4/G♭4 +1 369,9944
45 фа3 F4 +0 349,2288
44 ми3 E4 -0 329,6280
43 ре♯3 (ми♭3) D♯4/E♭4 -1 311,1272
42 ре3 D4 -2 293,6648
41 до♯3 (ре♭3) C♯4/D♭4 -3 277,1832
40 до3 C4 -4 261,6256
39 си2 B3 -5 246,9416
38 ля♯2 (си♭2) A♯3/B♭3 -6 233,0824
37 ля2 A3 -7 220,0000
36 соль♯2 (ля♭2) G♯3/A♭3 -8 207,6520
35 соль2 G3 -9 195,9980
34 фа♯2 (соль♭2) F♯3/G♭3 -10 184,9972
33 фа2 F3 -11 174,6144
32 ми2 E3 -12 164,8140
31 ре♯2 (ми♭2) D♯3/E♭3 -13 155,5636
30 ре2 D3 -14 146,8324
29 до♯2 (ре♭2) C♯3/D♭3 -15 138,5916
28 до2 C3 -16 130,8128
27 си1 B2 -17 123,4708
26 ля♯1 (си♭1) A♯2/B♭2 -18 116,5412
25 ля1 A2 -19 110,0000
24 соль♯1 (ля♭1) G♯2/A♭2 -20 103,8260
23 соль1 G2 -21 97,9990
22 фа♯1 (соль♭ 1) F♯2/G♭2 -22 92,4986
21 фа1 F2 -23 87,3072
20 ми1 E2 -24 82,4070
19 ре♯1 (ми♭1) D♯2/E♭2 -25 77,7818
18 ре1 D2 -26 73,4162
17 до♯1 (ре♭1) C♯2/D♭2 -27 69,2958
16 до1 C2 -28 65,4064
15 си0 B1 -29 61,7354
14 ля♯0 (си♭0) A♯1/B♭1 -30 58,2706
13 ля0 A1 -31 55,0000
12 соль♯0 (ля♭0) G♯1/A♭1 -32 51,9130
11 соль0 G1 -33 48,9995
10 фа♯0 (соль♭0) F♯1/G♭1 -34 46,2493

9	фа0	F1	-35	43,6536
8	ми0	E1	-36	41,2035
7	ре♯0 (ми♭0)	D♯1/E♭1	-37	38,8909
6	ре0	D1	-38	36,7081
5	до♯0 (ре♭0)	C♯1/D♭1	-39	34,6479
4	до0	C1	-40	32,7032
3	си−1	B0	-41	30,8677
2	ля♯−1 (си♭−1)	A♯0/B♭0	-42	29,1353
1	ля−1	A0	-43	27,5000

2. Описание функциональной составляющей программного компонента

Для создания и обработки изображений рассматривались различные цветовые модели, описанные выше, также учитывались их плюсы и минусы при разработке программных компонентов. Выбрали цветовую модель HSV; поскольку цветовое пространство априори разделено на цветовые зоны, то это позволяет упростить сопоставление элементов с частотой и делает данный процесс более интуитивным.

Отметим, что для создания данной программы необходим ряд библиотек, без которых оптимальная и лояльная к пользователю структура будет невозможна.

Список библиотек:

librosa=0.9.2 (версия актуальной программы на момент установки)[8];

numpy=1.21.6 (версия актуальной программы на момент установки)[9];

opencv-python-headless (версия актуальной программы на момент установки)[10;]

pandas=1.3.5 (версия актуальной программы на момент установки)[11];

pedalboard=0.5.9 (версия актуальной программы на момент установки)[12];

Pillow=9.2.0 (версия актуальной программы на момент установки)[13];

scipy=1.7.3 (версия актуальной программы на момент установки)[14];

streamlit=1.13.0 (версия актуальной программы на момент установки)[15].

В модели HSV тон представляет цвет, а именно: красный, зелёный, синий, фиолетовый, жёлтый, оранжевый.

---

[8]См.: Librosa – librosa 0.10.1 documentation [Электронный ресурс]. URL: https://librosa.org/doc/latest/index.html (дата обращения: 04.06.2023).

[9] См.: NumPy [Электронный ресурс]. URL: https://numpy.org/ (дата обращения: 04.06.2023).

[10] См.: Opencv-python-headless. 4.9.0.80 [Электронный ресурс]. URL: https://pypi.org/project/opencv-python-headless/ (дата обращения: 04.06.2023).

[11] См.: Pandas=1.3.5 documentation [Электронный ресурс]. URL: https://pandas.pydata.org/pandas-docs/version/1.3/ (дата обращения: 04.06.2023).

[12] См.: Pedalboard 0.8.7 [Электронный ресурс]. URL: https://pypi.org/project/pedalboard/ (дата обращения: 04.06.2023).

[13] См.: Pillow (PIL Fork) 10.2.0 documentation [Электронный ресурс]. URL: https://pillow.readthedocs.io/en/stable/ (дата обращения: 04.06.2023).

[14] См: SciPy=1.7.3 Release Notes [Электронный ресурс]. URL: https://docs.scipy.org/doc/scipy/release/1.7.3-notes.html (дата обращения: 04.06.2023).

[15] См.: Streamlit=1.13.0 [Электронный ресурс]. URL: https://pypi.org/project/streamlit/ (дата обращения: 04.06.2023).

Насыщенность в свою очередь отвечает за цветовой диапазон, который ответственен за яркость объекта.

Яркость отвечает за визуальную составляющую и представление объекта, влияющие на уровень свечения. Уровень смешения светового изображения с символом (-,-%, 0%) соответсвует чёрному.

Рассмотрим значение тона 6 цветов:

Красный от 320 до 360.
Фиолетовый от 260 до 320.
Синий от 150 до 260.
Зелёный от 76 до 150.
Жёлтый от 44 до 76.
Оранжевый от 0 до 44.

На основе цветового пространства рассмотрим код для его генерации:

```
# для считывания значения тона пикселя необходима функция
hsv = cv2.cvtColor(ori_img, cv2.COLOR_BGR2HSV)
# Алгоритм построение изображения
fig, axs = plt.subplots(1, 3, figsize = (15,15))
name = ['BGR','RGB','HSV']
img  = [img, hsv, ori_img]
i = 0
for el in img:
   axs[i].title.set_text(names[i])
   axs[i].imshow(elem)
   axs[i].grid(False)
   i += 1
plt.show()
```

После перекодирования изображения в HSV нам необходимо получить понятный угол радиуса вектора (тон h) для каждого пикселя изображения. В данном случае для этого действия нам необходимо использовать вложенный цикл for, в котором мы будем анализировать и проходить изображение по ширине и высоте.

Пример кода с вложенным циклом for:

```
i=0; j=0
```

Инициализируем массив, в котором закладываем алгоритм нахождения тона h каждого пикселя изображения.

```
hues = []
for i in range(height):
   for j in range(width):
      hue = hsv[i][j][0] # значение тона пикселя по координатам (i, j)
      hues.append(hue)
```

После получения значения тона h помещаем его в датафрейм Pandas. В этом датафрейме по левую сторону указывался номер пикселя, а по правую –

значение его тона. На данном этапе датафрейм состоит из ряда элементов, расположенных в одном столбце.

Следующий этап кода состоит из преобразования тона в частоту, сопоставляется предопределённый набор элементов (частот значения переменной h). Данному этапу программного кода соответствует следующая функция:

```
scale_freqs = [220.00, 246.94 ,261.63, 293.66, 329.63, 349.23, 415.30]
def hue2freq(h,scale_freqs):
    thresholds = [26 , 52 , 78 , 104,  128 , 154 , 180]
    note = scale_freqs[0]
    if (h <= thresholds[0]):
         note = scale_freqs[0]
    elif (h > thresholds[0]) & (h <= thresholds[1]):
        note = scale_freqs[1]
    elif (h > thresholds[1]) & (h <= thresholds[2]):
        note = scale_freqs[2]
    elif (h > thresholds[2]) & (h <= thresholds[3]):
        note = scale_freqs[3]
    elif (h > thresholds[3]) & (h <= thresholds[4]):
        note = scale_freqs[4]
    elif (h > thresholds[4]) & (h <= thresholds[5]):
        note = scale_freqs[5]
    elif (h > thresholds[5]) & (h <= thresholds[6]):
        note = scale_freqs[6]
    else:
        note = scale_freqs[0]
    return note
```

Функция принимает значение переменной h и элементы массива частот. В данной части кода для определения частоты элемента используется массив, именованный как scale_freqs. Частоты этого массива полностью соответствуют тональности Ля минор.

Далее определяется значение порога, которое обозначено переменной thresholds для h, при помощи которой в дальнейшем будут преобразовывать h в частоту массива scale, посредством функции лямбды.

```
pixels_df['notes'] = pixels_df.apply(lambda row : hue2freq(row['hues'],scale_freqs)
```

Следующим логическим этапом идёт преобразование массива библиотеки NumPy в звуковое преображение. Столбец с массивом частоты преобразуется в массив NumPy, с помощью которого как раз можно сгенерировать аудиосигналы. Для этого используются SciPy – функции wavfile.write, поскольку массив имеет различный тип данных, для одномерного массива используется np.float32.

```
frequencies = pixels_df['notes'].to_numpy()
song = np.array([])
sr = 22050 # частота дискретизации
T = 0.1  # продолжительность
t = np.linspace(0, T, int(T*sr), endpoint=False) # определение переменной времени
#создание звукового преобразования NumPy :]
#nPixels = int(len(frequencies))# точки (пиксели) изображения
nPixels = 60
for i in range(nPixels):
   val = frequencies[i]
   note  = 0.5*np.sin(2*np.pi*val*t) # представление каждого элемента (ноты) в виде синусоиды
   song  = np.concatenate([song, note]) # добавляет ноту в массив (song) для объединения и создания звукового преобразования.
ipd.Audio(song, rate=sr) # загрузка цельного массива библиотеки NumPy в форме аудио.
```

Уже на данном этапе можно воспользоваться программой и получить композицию по изображению. Благодаря задействованию определённого объёма пикселей и изображения можно получить продолжительность и насыщенность трека. Но вариативности всё ещё не хватает. Далее следует добавить различные дополнительные возможности манипуляции с настройками.

2.1. Работа с пикселями

Внесём ещё один элемент в цикл, который позволит произвести сдвиг октав. То есть в определённый момент времени будет браться определённая октава для ноты из массива элементов. Для работоспособности данной идеи используется следующий программный код в цикле:

```
octave=random.choice(octaves)
```

Благодаря внесению данного элемента вносится больше разнообразия в аудио. Теперь можно работать с пикселями, поскольку изображение строится из сотни пикселей, мы можем произвольным образом генерировать схему, по которой программа будет выбирать случайным образом сетку точек и, обрабатывая их, воспроизводить мелодию.

```
val=octave * random.choice(frequencies)# в переменную val добавляем элемент случайной выборки пикселей.
```

Теперь можно внести куда больше разнообразия в настройку мелодии, полученную с изображения. В программе, приведённой выше, использовалась одна гамма Ля минор, но при всех плюсах данной гармоники всё равно происходит множество подходящих и однотипных композиций, чтобы получилось изменить однотипность, необходимо внести следующие изменения в программный компонент кода.

Заключение

В этой части работы были выполнены преобразования цветовых изображений в пиксельную сетку. Каждый пиксель содержит информацию о цвете, яркости и насыщенности. Также были выполнены преобразования нот, тональности и их частот в звуковое отображение. Найдены преобразования сетки пиксельной структуры в звуковое (частотное) отображение. Однако при настройке программы по гармонике Ля минор существует множество подходящих и однотипных композиций. Чтобы изменить однотипность, необходимо внести изменения в программный компонент кода.

Статья поступила в редакцию 10.08.2023 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Amani M., Falk H., Jensen O. D., Vartdal G., Aune A., Lindseth F. Color Calibration on Human Skin Images // International Conference on Computer Vision Systems. ICVS 2019 / eds. Tzovaras D., Giakoumis D., Vincze M., Argyros A. Cham: Springer, 2019. P. 211–223 (Series: Lecture Notes in Computer Science. Vol. 11754). DOI: 10.1007/978-3-030-34995-0_20.
2. Чижов С. А. Управление цветом в широкоформатной печати: RGB VS CMYK // Science Time. 2018. № 9 (57). С. 43–47.
3. Open music theory. Version 2.0 / M. Gotham, K. Gullings, Ch. Hamm et al. Oklahoma State University, 2021 [Электронный ресурс]. URL: https://viva.pressbooks.pub/openmusictheory/ (дата обращения: 04.06.2023).

REFERENCES

1. Amani M., Falk H., Jensen O. D., Vartdal G., Aune A., Lindseth F. Color Calibration on Human Skin Images. In: Tzovaras D., Giakoumis D., Vincze M., Argyros A., eds. International Conference on Computer Vision Systems. ICVS 2019. Cham, Springer, 2019, pp. 211–223 (Series: Lecture Notes in Computer Science. Vol. 11754). DOI: 10.1007/978-3-030-34995-0_20.
2. Chizhov S. A. [Color management in large-format printing: RGB VS CMYK]. In: *Science Time*, 2018, no. 9 (57), pp. 43–47.
3. Gotham M., Gullings K., Hamm Ch. et al. Open music theory. Version 2.0. Oklahoma State University, 2021. Available at: https://viva.pressbooks.pub/openmusictheory/ (accessed: 04.06.2023).

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Ключников Семён Александрович – студент магистратуры физико-математического факультета Государственного университета просвещения;
e-mail: semen.klyuchnikov@mail.ru;

Калашников Евгений Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры вычислительной математики и информационных технологий Государственного университета просвещения;
e-mail: ekevkalashnikov1@gmail.com.

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Semen A. Klyuchnikov – Master's Degree Student, Faculty of Physics and Mathematics, Federal State University of Education;
e-mail: semen.klyuchnikov@mail.ru;

Evgenii V. Kalashnikov –Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Computational Mathematics and Information Technology, Federal State University of Education;
e-mail: ekevkalashnikov1@gmail.com.

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Ключников С. А., Калашников Е. В. Преобразование пиксельной структуры в звуковые отображения. Часть 1 // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2023. № 4. С. 64–80.
DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-64-80

FOR CITATION

Klyuchnikov S. A., Kalashnikov E. V. Converting a pixel structure into sound imaginations. Part 1. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2023, no. 4, pp. 64–80.
DOI: 10.18384/2949-5067-2023-4-64-80

Для заметок

ПРО СВЕТ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ПРОСВЕЩЕНИЯ

ВЕСТНИК
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА ПРОСВЕЩЕНИЯ

СЕРИЯ: ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА
2023. № 4

Над номером работали:

Литературный редактор М. С. Тарасова
Переводчик В. А. Дворянов
Корректор М. С. Тарасова
Компьютерная вёрстка – Д. А. Заботина

Адрес редакции:

105005, г. Москва, ул. Радио, д. 10А, стр. 1, офис 98
тел. (495) 780-09-42 доб. 6101
e-mail: info@vestnik-mgou.ru
Сайты: www.physmathmgou.ru;
www.vestnik-mgou.ru

Формат 70x108/16. Бумага офсетная. Печать офсетная. Гарнитура "Minion Pro".
Тираж 500 экз. Усл. п. л. 5,25, уч.-изд. л. 3,75.
Подписано в печать: 28.12.2023 г. Дата выхода в свет: 27.02.2024 г. Заказ № 2023/12-12.
Отпечатано в Государственном университете просвещения
105005, г. Москва, ул. Радио, д. 10А, стр. 1