

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



естник

ГОСУДАРСТВЕННОГО ЧНИВЕРСИТЕТА ПРОСВЕЩЕНИЯ

Серия



ВЯЗКОУПРУГОСТЬ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЕ

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ПИКСЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ В ЗВУКОВЫЕ ОТОБРАЖЕНИЯ. ЧАСТЬ 2

ЧИСЛЕННОЕ И АНАЛИТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТУРБУЛИЗАЦИИ СВЕРХЗВУКОВОГО ПОТОКА ВЯЗКОГО ГАЗА



2024/№ 1

ВЕСТНИК ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА ПРОСВЕЩЕНИЯ

ISSN 2949-5083 (print)

2024 / № 1

ISSN 2949-5067 (online)

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) 2024 / № 1 (ISSN 2949-5067 (online) 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 ———

Редакционная коллегия

Главный редактор:

Бугаев А. С. – д. ф.-м. н., академик РАН, Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Заместитель главного редактора:

Кузнецов М. М. — д. ф.-м. н., проф., Государственный университет просвещения

Ответственный секретарь:

Чукаловская Е. М. – Государственный университет просвещения

Члены редакционной коллегии:

Беляев В. В. – д. т. н., проф., Государственный университет просвещения;

Боголюбов Н. Н. — д. ф.-м. н., проф., Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова;

Бугримов А. Л. – д. т. н., проф., Российский государственный университет имени А.Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство);

Гладков С. О. – д. ф.-м. н., проф., Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет);

Емельяненко А. В. – д. ф.-м. н., проф., Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова;

Жачкин В. А. – д. ф.-м. н., проф., Государственный университет просвещения;

Калашников Е. В. — д. ф.-м. н., проф., Государственный университет просвещения;

Осипов М. А. – д. ф.-м. н., проф., Университет Стратклайд (Великобритания);

Рыбаков Ю. П., – д. ф.-м. н., проф., Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы;

Чаругин В. М. — д. ф.-м. н., проф., Московский педагогический государственный университет;

Чигринов В. Г. – д. ф.-м. н., проф., Гонконгский университет науки и технологий (Китай)

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; теоретической теории равновесных и неравновесных систем; теоретической 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 такжена сайте журнала «Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика» (www.physmathmgou.ru).

При цитировании ссылка на конкретную серию «Вестника Государственного университета просвещения» обязательна. Публикация материалов осуществляется в соответствии с лицензией Creative Commons Attribution 4.0 (CC-BY).

Ответственность за содержание статей несут авторы. Мнение автора может не совпадать с точкой зрения редколлегии серии. Рукописи не возвращаются.

Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-математика. – 2024. – № 1. – 84 с.

© Государственный университет просвещения, 2024.

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»

Federal State University of Education

____ Issued 4 times a year ____

Editorial board

Editor-in-chief :

A. S. Bugaev – Doctor of Physics and Mathematics, Academican of RAS, Moscow Institute of Physics and Technology

Deputy editor-in-chief:

M. M. Kuznetsov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Federal State University of Education

Executive secretary:

E. M. Chukalovskaya – Federal State University of Education

Members of Editorial Board:

V. V. Belyaev – Doctor of Technical Sciences, Professor, Federal State University of Education;

N. N. Bogolyubov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Lomonosov Moscow State University;

A. L. Bugrimov – Doctor of Technical Sciences, Professor, The Kosygin State University of Russia;

S. O. Gladkov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow Aviation Institute (National Research University);

A. V. Emelyanenko – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Lomonosov Moscow State University;

V. A. Zhachkin – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Federal State University of Education;

E. V. Kalashnikov – Doctor of Physics and Mathematics, Federal State University of Education;

M. A. Osipov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, University of Strathclyde (Glasgow, UK);

Yu. P. Rybakov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, People's Friendship University of Russia;

V. M. Charugin – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow State Pedagogical University;

V. G. Chigrinov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Hong Kong University of Science and Technology (China)

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 $\Pi I \ \Omega^{\circ} \Phi C \ 77 - 73344$.

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 site of "Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics" (www. physmathmgou.ru).

At citing the reference to a particular series of «Bulletin of State University of Education» is obligatory. Scientific publication of materials is carried out in accordance with the license of Creative Commons Attribution 4.0 (CC-BY).

The authors bear all responsibility for the content of their papers. The opinion of the Editorial Board of the series does not necessarily coincide with that of the author Manuscripts are not returned.

Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics. $-2024. - \mathbb{N}^2 \mathbf{1}. - 84 \mathbf{p}.$

© SUE, 2024.

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

Вековищев М. П., Кирсанов Е. А. Вязкоупругость углеродных
нанотрубок в полимерной матрице6
Иванов Ю. Д., Аблеев А. Н., Шумянцева В. В., Жданов Д. Д.,
Покровская М. В., Александрова С. С., Иванова И. А.,
Виноградова А. В., Неведрова Е. Д., Зиборов В. С., Ваулин Н. В.,
Лебедев Д. В., Букатин А. С., Мухин И. С., Арчаков А. И. Регистрация
активности единичных молекул аспарагиназы с помощью
нанопорового детектора
<i>Ключников С. А., Калашников Е. В.</i> Преобразование пиксельной структуры в звуковые отображения. Часть 2
<i>Красавин Е. Э.</i> Оценка степени неравновесности газа в сверхзвуковых потоках
<i>Никитченко Ю. А., Сергеева Н. И.</i> Модельное кинетическое уравнение для смеси одно- и многоатомных газов
<i>Тугазаков Р. Я.</i> Численное и аналитическое исследование
туроулизации сверхзвукового потока вязкого газа

CONTENTS

PHYSICS

<i>M. Vekovishchev, E. Kirsanov.</i> Viscoelasticity of carbon nanotubes in a polymer matrix
Yu. Ivanov, A. Ableev, V. Shumyantseva, D. Zhdanov, M. Pokrovskaya,
S. Aleksandrova, I. Ivanova, A. Vinogradova, E. Nevedrova, V. Ziborov,
N. Vaulin, D. Lebedev, A. Bukatin, I. Mukhin, A. Archakov. Registration of
asparaginase single molecule activity using a nanopore detector20
S. Klyuchnikov, E. Kalashnikov. Converting a pixel structure
into sound imaginations. Part 2
E. Krasavin. Assessment degree of disequilibrium gase
in supersonic flows
Yu. Nikitchenko, N. Sergeeva. Model kinetic equation of mono- and
polyatomic gas mixture
R. Tugazakov. Numerical and analytical study of turbulence
of supersonic viscous gas flow

1

ФИЗИКА

УДК 541. 182. 022: 532. 135 DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-6-19

ВЯЗКОУПРУГОСТЬ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЕ

Вековищев М. П., Кирсанов Е. А.

Государственный социально-гуманитарный университет 140411, Московская обл., г. Коломна, ул. Зелёная, д. 30, Российская Федерация

Аннотация

Цель: рассмотреть вязкоупругие характеристики расплавов полимерных композитов с наполнителем в виде углеродных нанотрубок.

Процедура и методы. Проведена аппроксимация экспериментальных данных динамических измерений уравнениями структурной реологической модели на отдельных интервалах циклической частоты сдвиговых колебаний.

Результаты. Показана возможность применения уравнений структурной модели для описания реологических кривых в условиях линейной вязкоупругости. Установлена связь коэффициентов реологических уравнений с состоянием структуры композитного материала.

Теоретическая и/или практическая значимость. Предложены уравнения, которые способны аппроксимировать экспериментальные данные на отдельных интервалах частоты сдвиговых колебаний, соответствующих определённому структурному состоянию расплава полимера и полимерного композита.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, расплав полимерного композита, структурная реологическая модель, модули потерь, модули накопления

[@] СС ВУ Вековищев М. П., Кирсанов Е. А., 2024.

VISCOELASTICITY OF CARBON NANOTUBES IN A POLYMER MATRIX

M. Vekovishchev, E. Kirsanov

State University of Humanities and Social Studies ulitsa Zelyonaya 30, Kolomna 140411, Moscow region, Russian Federation

Abstract

Aim. We consider the viscoelastic characteristics of melts of polymer composites with filler in the form of carbon nanotubes.

Methodology. The experimental data of dynamic measurements are approximated by the equations of a structural rheological model at separate intervals of the cyclic frequency of shear oscillations.

Results. The possibility of applying the equations of the structural model to describe rheological curves under conditions of linear viscoelasticity is shown. The relationship of the coefficients of rheological equations with the state of the composite material structure is established.

Research implications. Equations are proposed that are capable of approximating experimental data at separate frequency intervals of shear oscillations corresponding to a certain structural state of the polymer melt and polymer composite.

Keywords: carbon nanotubes, polymer composite melt, structural rheological model, loss modules, storage modules

Введение

Углеродные нанотрубки являются перспективным материалом, который используется для создания новых композитных систем. Для обеспечения необходимо реологические технологического процесса знать свойства расплавов этих веществ. Композиты С углеродными нанотрубками демонстрируют неньютоновское поведение, в частности сдвиговое разжижение, и вязкоупругие свойства [1–4]. Они используются как добавки в красителях для струйных принтеров, в качестве материалов для 3D-принтеров [5; 6].

Реологическое поведение вязкоупругих текучих материалов описывают реологическими кривыми. Они являются основным источником сведений [7; 8] о процессах стационарного и осциллирующего течения в структурированных жидкостях (суспензиях, эмульсиях, расплавах и растворах полимеров).

Результаты динамических измерений позволяют получить зависимости модуля потерь G'' и модуля накопления G' от циклической частоты ω . Такие измерения производят при малых амплитудах сдвиговых колебаний γ_0 , чтобы уменьшить воздействие сдвиговой деформации на структуру вещества. Предполагается, что в области линейной вязкоупругости структура вещества не изменяется при изменении частоты колебаний [7].

Описание реологических кривых подразумевает разделение полного интервала частот на участки с определённым характером реологического поведения [8]. В районе низких частот существует «вязкий или терминальный» район, где модуль потерь G'' существенно больше модуля накопления G'. Для

、7 丿

предельно низких частот справедливы функциональные зависимости $G'' \sim \omega$ и $G' \sim \omega^2$. Район «перехода к течению» содержит точку пересечения (точку кроссовера), где G'' = G'. В последующем районе «вязкоэластичного или каучукоподобного» поведения доминирует упругость (G'' < G'), причём наклон кривой log $G'(\log \omega)$ настолько мал, что говорят о существовании G'-плато. В некоторых случаях величина модуля G'' сначала уменьшается, а затем увеличивается с ростом частоты ω , образуя некое «псевдоплато». В последующем районе «перехода» часто наблюдается вторая точка пересечения (точка кроссовера). В последующем районе «стеклования» модуль накопления G' имеет очень большую величину и слабо зависит от частоты. Предполагается, что характерные особенности кривых $G'(\omega)$ и $G''(\omega)$ связаны с реакцией системы на внешнюю периодическую деформацию, но сама структура вещества не изменяется на всём интервале частот.

В предлагаемой работе проводится анализ реологических кривых расплава полимера и расплава полимерного композита с помощью реологических уравнений структурной модели.

Вязкое поведение при осциллирующем течении

В работе [9] рассмотрено реологическое поведение полимерного композита, состоящего из многослойных углеродных нанотрубок (MWCNT) в расплаве полистирола (PS). Процесс подготовки однородного образца подробно описан в [9]. Средневесовая молекулярная масса полистирола равна 148000, среднечисловая молекулярная масса равна 48000. Динамические модули измерены с помощью ротационного вискозиметра с управляемой деформацией сдвига (CR – реометр) в геометрии параллельных пластин. Измерения проведены при температуре 210°С на интервале от 0,03 до 100 рад/с с амплитудой сдвиговой деформации $\gamma_0 = 3\%$ (внутри интервала линейной вязкоупругости).

Экспериментальные результаты частотных зависимостей модулей $G'(\omega)$ и $G''(\omega)$ представлены на рис. 1, *а* и 3, *а* в традиционных двойных логарифмических координатах. В работе [9] отмечено существенное различие формы реологических кривых «чистого» расплава полистирола и композита с углеродными нанотрубками, особенно в области низкой циклической частоты. Это реологическое поведение объясняют наличием агрегатов нанотрубок и постепенным разрушением этих агрегатов при увеличении циклической частоты.

Будем рассматривать отдельно «вязкое» и «упругое» поведение полимерной системы. В рамках структурной реологической модели [10] предполагается, что в области линейной вязкоупругости происходит изменение структуры вещества под действием сдвига. На отдельных интервалах частот существуют различные режимы осциллирующего течения, связанные с характером изменения структуры в результате изменения амплитуды скорости сдвига γ₀ Φ.

2024 / № 1



Рис. 1 / Fig. 1. Зависимость модуля потерь расплава полистирола и полимерного композита от циклической частоты при температуре 210°С и содержании углеродных нанотрубок 0% (1); 2 мас. % (2); 3 мас. % (3):

a – в двойных логарифмических координатах; δ –в корневых координатах / The dependence of the loss modulus of polystyrene melt and polymer composite on the cyclic frequency at a temperature of 210 ° C and the content of carbon nanotubes 0% (1); 2 wt. %

(2); 3 wt. % (3): a – in double logarithmic coordinates; 6 – in root coordinates Источник: [9].

Вязкое поведение можно описать в рамках структурной модели [10], используя реологические уравнения для двух режимов осциллирующего течения на отдельных участках реологической кривой. Каждому режиму соответствует определённое изменение структуры вещества. В полимерном композите возможны следующие процессы: разрушение и формирование зацеплений между макромолекулами; разрушение и формирование контактов между частицами-нанотрубками; разрушение и формирование контактов между нанотрубками и макромолекулами.

Если под действием сдвига зацепления (или контакты) разрываются (но не формируются за счёт сдвига), то уравнение для модуля потерь имеет вид [10]:

$$G''^{1/2} = \frac{g'\omega^{1/2}}{\omega^{1/2} + \chi'} + \eta_{\infty}^{\prime 1/2}\omega^{1/2} . \qquad (1, a)$$

Поскольку $\eta' = G'' / \omega$, то можно записать уравнение для динамической вязкости:

$$\eta'^{1/2} = \frac{g'}{\omega^{1/2} + \chi'} + \eta_{\infty}'^{1/2} . \qquad (1, 6)$$

Коэффициент агрегации g' описывает прочность зацеплений между макромолекулами или контактов между частицами. Коэффициент χ' указывает на тенденцию образования рыхлых агрегатов частиц или ассоциатов макромолекул (при нулевом значении χ' следует говорить о сетке, заполняющей весь образец). Коэффициент $\eta_{\infty}'^{1/2}$ описывает вязкость, возникающую за счёт обтекания отдельных (индивидуальных) частиц или макромолекул.

Используя кинетическое уравнение разрушения/формирования агрегатов частиц (ассоциатов макромолекул), получим значения коэффициентов, присутствующих в уравнении (1): $\chi' = k'_0 / k'_1$; $g' = B' N k'_2 / k'_1$. Величина N равна количеству частиц или макромолекул в единице объёма, B' – некоторый коэффициент, не зависящий от частоты колебаний.

Коэффициенты кинетического уравнения имеют следующий смысл: k'_2 – константа скорости формирования агрегатов при столкновениях частиц; k'_0 – константа скорости спонтанного разрушения агрегатов, например, в результате теплового движения; k'_1 – константа скорости разрушения агрегата под действием растягивающих гидродинамических сил, k'_3 – константа скорости формирования агрегатов частиц из одиночных частиц под действием сдвигового течения.

Если под действием гидродинамических сил возникают новые контакты или зацепления, то формируются новые агрегаты частиц или ассоциаты макромолекул. Этот процесс идёт одновременно с разрывом контактов или зацеплений.

Реологическое уравнение для этого режима осциллирующего течения имеет вид:

$$G''^{1/2} \approx g'_0 \omega^{1/2} + \Delta G''^{1/2},$$
 (2)

где $g'_0 = \eta'^{1/2}_{\infty} + B'Nk'_3 / (k'_3 + k'_1); \ \Delta G''^{1/2} = B'N(k'_2 - k'_0) / (k'_3 + k'_1).$

Коэффициент $\Delta G''^{1/2}$ является отрицательным, если $k'_0 > k'_2$, и положительным, если $k'_0 < k'_2$. Если $k'_0 \approx k'_2$, то реологическое поведение похоже на «ньютоновское» с практически постоянным значением динамической вязкости η' .

Рассмотрим зависимость модуля потерь исходного полимера и полимерного композита от частоты. Аппроксимация проводится методом нелинейной регрессии в пакете Excel. Кривая течения расплава полистирола описывается уравнением (1) на всём интервале измерений. При добавлении углеродных нанотрубок экспериментальная кривая может быть разделена на две части (рис. 1). В области высоких частот (от 1 с⁻¹ до 100 с⁻¹) экспериментальные данные хорошо аппроксимируются уравнением (1). Справедливость уравнения (1) подтверждается на графике в корневых координатах (рис. 1, δ).

В области низких частот (от 0,03 с⁻¹ до 0,6 с⁻¹) экспериментальные данные хорошо аппроксимируются уравнением (2). Справедливость уравнения (2) подтверждается на графике в корневых координатах, построенном для интервала низких частот (рис. 2). Значения коэффициентов реологических уравнений приведены в табл. 1.

. 10 /



Рис. 2 / Fig. 2. Зависимость модуля потерь расплава полимерного композита от циклической частоты в корневых координатах на интервале низких частот при температуре 210°C:

a – содержание углеродных нанотрубок 3 мас. %; б – содержание нанотрубок 2 мас. % / The dependence of the loss modulus of the polymer composite melt on the cyclic frequency in root coordinates in the low frequency range at a temperature of 210°C:

а – content of carbon nanotubes of 3 wt. %; 6 – nanotube content of 2 wt. % Источник: [9].

Таблица 1 / Table 1

Коэффициенты уравнений для модуля потерь в расплавах полистирола и полимерного композита при различных массовых концентрациях углеродных нанотрубок / The coefficients of equations for the loss modulus in polystyrene melts and polymer composite at different mass concentrations of carbon nanotubes

$\Phi_{\scriptscriptstyle W}$ %	0	2	3
g' , $\Pi a^{1/2}$	185,9	116,01	146,49
$η_{\infty}^{\prime_{1/2}}$,(Πa c) $^{1/2}$	3,03	6,67	7,36
χ' , c ^{-1/2}	4,75	1,71	1,47
g'/χ' ,(Па с) ^{1/2}	39,17	67,76	99,45
$η'^{1/2}(0)$ (Πa c) ^{1/2}	42,20	74,43	106,81
g'_0 , (Па с) ^{1/2}	-	42,41	51,87
$\Delta G^{\prime\prime_{1/2}}$, $\Pi a^{1/2}$	-	10,94	20,82

Источник: по данным авторов

В рамках структурной реологической модели [10] коэффициент g', связан с прочностью зацеплений макромолекул и с прочностью контактов между частицами. В случае полимерного композита присутствуют контакты двух видов: между нанотрубками и между макромолекулами. Величина g', вероятно, является усреднённой по всем видам контактов. Величина коэффициента $\eta_{\infty}'^{1/2}$ для расплава полимера связана с вязкостью, обусловленной движением отдельных макромолекул в отсутствие зацеплений. Соответствующая вязкость аналогична вязкости обычной низкомолекулярной жидкости. При увеличении концентрации добавленных частиц-нанотрубок коэффициент $\eta_{\infty}'^{1/2}$ увеличивается подобно коэффициенту вязкости «ньютоновской» суспензии.

Величина коэффициента компактности χ' уменьшается с ростом концентрации нанотрубок. Коэффициент χ' пропорционален вероятности спонтанного разрыва контактов, т. е. зацеплений между макромолекулами, контактов между нанотрубками, контактов между макромолекулами и нанотрубками.

Структурная часть динамической вязкости g'/χ' может увеличиваться с ростом концентрации нанотрубок за счёт увеличения общего количества зацеплений и за счёт резкого уменьшения вероятности спонтанного разрыва контактов. Важно отметить, что структурная вязкость $(g'/\chi')^2$ много больше суммарной вязкости независимых частиц η'_{∞} .

Режим низких частот в нанокомпозитах соответствует состоянию осциллирующего течения, при котором сосуществуют процессы разрывов контактов и формирования контактов под действием сдвига. Коэффициент $\Delta G''^{1/2}$ является положительным, поэтому в соответствии с уравнением (2) получим $k'_0 < k'_2$. Динамическая вязкость равна $\eta' = G''/\omega$ и уменьшается с ростом частоты, что свидетельствует о преобладании процесса разрушения контактов над процессом формирования в результате сдвига.

Упругое поведение при осциллирующем течении

Уравнение для модуля накопления в случае разрыва зацеплений имеет вид [10]:

$$G'^{1/2} = \frac{g'' \omega^{1/2}}{\omega^{1/2} + \chi''} + \eta_{\infty}''^{1/2} \omega^{1/2} , \qquad (3, a)$$

Поскольку $\eta'' = G' / \omega$, то уравнение для динамической упругости η'' приобретает вид

$$\eta''^{1/2} = \frac{g''}{\omega^{1/2} + \chi''} + \eta_{\infty}''^{1/2} .$$
(3, 6)

Первое слагаемое представляет собой структурную часть модуля накопления (или динамической упругости), обусловленную упругостью ассоциатов макромолекул; второе слагаемое описывает часть модуля накопления (или динамической упругости), связанную с упругостью отдельных макромолекул. ISSN 2949-5083

Таким образом, макромолекулы и их «упругие» ассоциаты можно представить в виде некоторых «молекулярных пружин». С увеличением частоты колебаний и, соответственно, амплитуды скорости сдвига $\omega\gamma_0$ зацепления разрываются, и упругость «молекулярных пружин» уменьшается. Соответственно, с ростом частоты уменьшается величина динамической упругости $\eta'' = G'(\omega)/\omega$ и увеличивается величина G'.

Если агрегаты частиц (или ассоциаты макромолекул) отсутствуют, то динамическая упругость обеспечивается упругими свойствами отдельных частиц (или макромолекул), т. е. величиной $\eta_0^{\prime '1/2}$. Используя кинетические уравнения, можно рассчитать значения коэффициентов в уравнении (3): $\chi'' = k_0^{\prime \prime}/k_1^{\prime \prime}$; $g'' = B''N k_2^{\prime \prime}/k_1^{\prime \prime}$.

При низких циклических частотах количество «упругих» ассоциатов и зацеплений может увеличиваться с ростом частоты, поскольку возникают дополнительные упругие контакты за счёт гидродинамических сил при столкновениях макромолекул. Поэтому при низких частотах может наблюдаться участок, описываемый уравнением, линейным в корневых координатах, а именно:

$$G'^{1/2} \approx g_0'' \omega^{1/2} + \Delta G'^{1/2}$$
 (4)

При дальнейшем уменьшении частоты колебаний в отдельных случаях появляется кривая степенной зависимости $G' = g_2 \omega^n$, где n ≈ 2 .

С помощью кинетических уравнений можно получить значения коэффициентов:

$$g_0'' = \eta_{\infty}''^{1/2} + B''Nk_3''/(k_3''+k_1'');$$
 $\Delta G'^{1/2} = B''N(k_2''-k_0'')/(k_3''+k_1'').$
Коэффициент $\Delta G'^{1/2}$ является отрицательным, если $k_0'' > k_2''$, и положительным, если $k_0'' < k_2''$.

Кривые частотной зависимости модуля накопления (рис. 3) можно разделить на отдельные части, которые описываются различными реологическими уравнениями. Выбор интервалов аппроксимации можно осуществить, используя корневые координаты, как показано на рис. 3–5. Прямолинейные зависимости указывают на возможность применения уравнения (4). Экспериментальная зависимость, постепенно выходящая на «прямую» в области высоких частот, указывает на возможность применения уравнения (3). Значения коэффициентов реологических уравнений приведены в табл. 1.



Рис. 3 / Fig. 3. Зависимость модуля накопления расплава полистирола и полимерного композита от циклической частоты при температуре 210°С и содержании углеродных нанотрубок 0% (1); 2 мас. % (2); 3 мас. % (3):

a – в двойных логарифмических координатах; δ – в корневых координатах / The dependence of storage modulus of polystyrene melt and polymer composite on the cyclic frequency at a temperature of 210°C and a carbon nanotube content of 0% (1); 2 wt. % (2);

3 wt. % (3): a – in double logarithmic coordinates; 6 – in root coordinate Источник: [9].





a – содержание углеродных нанотрубок 0%; *б* – содержание нанотрубок 2 мас.% / The dependence of storage modulus of polystyrene melt and polymer composite on the cyclic frequency in root coordinates at a low frequency range at a temperature of 210°C: *a* – the content of carbon nanotubes is 0%; *б* – the content of nanotubes is 2 wt. %
Источник: [9].

. 14 /

ISSN 2949-5083



Рис. 5 / Fig. 5. Реологические характеристики расплава полистирола и полимерного композита при температуре 210°С:

 а – зависимость модуля накопления от циклической частоты в корневых координатах на интервале низких частот при содержании нанотрубок 3 мас. %;

б – зависимость структурной части вязкости и структурной части упругости от массового содержания нанотрубок (мас. %) /

Rheological characteristics of polystyrene melt and polymer composite at a temperature of 210°C:

a – dependence of the storage modulus on the cyclic frequency in root coordinates in the low frequency range at a nanotube content of 3 wt. %;

 6 – dependence of the structural part of viscosity and the structural part of elasticity on the mass content of nanotubes (wt. %)

Источник: [9].

Таблица 2 / Table 2

Коэффициенты уравнений для модуля накопления в расплавах полистирола и полимерного композита при различных массовых концентрациях углеродных нанотрубок / The coefficients of equations for the storage modulus in polystyrene melts and polymer composite at different mass concentrations of carbon nanotubes

$\Phi_{\scriptscriptstyle W}$ %	0	2	3
$g^{\prime\prime}$, $\Pi a^{1/2}$	451,45	176,26	146,80
$\eta_{\infty}^{\prime\prime_{1/2}}$,(Π a c) $^{1/2}$	0	4,16	8,99
χ'' , c ^{-1/2}	21,18	4,31	1,72
$g^{\prime\prime}/\chi^{\prime\prime}$, (Па с) $^{1/2}$	21,31	40,89	85,13
$\eta''^{1/2}(0) (\Pi a c)^{1/2}$	21,31	45,05	94,12
$g_0^{\prime\prime}$, (Па с) $^{1/2}$	20,76	24,14	23,34
$\Delta G'^{1/2}$, $\Pi a^{1/2}$	-4,65	19,44	50,69
g_0'' , (Па с) ^{1/2}	14,22	-	31,22
$\Delta G'^{1/2}$, $\Pi a^{1/2}$	-0,88	-	42,55

Источник: по данным авторов

Судя по табл. 2, «упругое» поведение при высоких частотах соответствует состоянию, когда структура только разрушается при увеличении частоты колебаний. При этом величина коэффициента g'' существенно уменьшается по мере увеличения содержания нанотрубок. Вклад в упругость отдельных макромолекул в «чистом» полимере практически исчезает ($\eta_{\infty}^{''1/2} \approx 0$). По мере увеличения числа нанотрубок в матрице коэффициент $\eta_{\infty}^{''1/2}$ постепенно возрастает, т. е. отдельные нанотрубки вносят свой вклад в общую упругость вещества.

Коэффициент χ'' , пропорциональный вероятности разрыва «упругих» зацеплений, уменьшается с добавлением дисперсной фазы (нанотрубок). Это поведение можно объяснить уменьшением вероятности разрыва «упругих» контактов в смеси макромолекул и нанотрубок.

Структурная часть динамической упругости g''/χ'' увеличивается с ростом концентрации нанотрубок, демонстрируя увеличение количества «упругих» зацеплений макромолекул и нанотрубок.

На рис. 5, *б* показаны зависимости структурной части упругости и структурной части вязкости от концентрации нанотрубок. Видимая корреляция между этими зависимостями говорит об общей структурной природе вязких и упругих свойств в полимерных и композитных системах.

Режим низких частот в расплаве полистирола соответствует состоянию, при котором сосуществуют процессы разрывов упругих контактов и формирования контактов за счёт гидродинамических сил в процессе сдвигового течения. Величина $\Delta G'^{1/2}$ отрицательна, т. е. $k_0'' > k_2''$. Динамическая упругость $\eta'' = G'/\omega$ увеличивается с ростом частоты, т. е. доминирует процесс формирования контактов над процессом разрушения контактов в результате сдвига.

Наличие агрегатов нанотрубок в нанокомпозитах изменяет состояние осциллирующего течения при низких частотах. Коэффициент $\Delta G'^{1/2}$ становится положительным, поэтому в соответствии с уравнением (2) получим $k''_0 < k''_2$. Динамическая упругость равна $\eta'' = G'/\omega$ и уменьшается с ростом частоты, что свидетельствует о преобладании процесса разрушения упругих контактов над процессом формирования в результате сдвига.

Выводы

Вязкоупругое поведение полимерного композита, состоящего из многослойных углеродных нанотрубок в расплаве полистирола, описано с помощью структурной реологической модели. Показано, что реологические свойства расплава полистирола сходны со свойствами других полимеров и хорошо описываются уравнениями структурной модели. Наполнение расплава нанотрубками изменяет реологическое поведение, преимущественно в районе низких частот, увеличивая структурную составляющую динамической вязкости и динамической упругости.

Статья поступила в редакцию 20.12.2023 г.

ЛИТЕРАТУРА

- Ma A., Chinesta F., Mackley M. Rheological modeling of carbon nanotube aggregate suspensions // Journal of Rheology. 2009. Vol. 52. Iss. 6. P. 1311–1330. DOI: 10.1122/1.2982932.
- A review of the microstructure and rheology of carbon nanotube suspensions / Ma A. W. K., Yearsley K. M., Chinesta F., Mackley M. R. // Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part N: Journal of Nanoengineering and Nanosystems. 2009. Vol. 222. Iss. 3. P. 71–94. DOI: 10.1243/17403499JNN153.
- Lahlou S., Sehaqui R., Lahlou N. Thermal transfer of Nanofluids based on carbon nanotubes/glycerol and study of their rheological behavior // MATEC Web of Conferences. 2019. Vol. 286: 14th Congress of Mechanics (CMM2019). Article Number: 08003. DOI: 10.1051/matecconf/201928608003.
- 4. Degree of MWCNT suspension dispersity and its influence on rheology of cement pastes / Skripkiunas G., Karpova E., Bendoraitiene J., Barauskas I., Drochytka R. // Selected papers of the 13th International Conference "Modern building materials, structures and techniques" (MBMST 2019, 16–17 May 2019, Vilnius, Lithuania). Vilnus: Vilnus Gediminas Technical University, 2019. P. 166–174. DOI: 10.3846/mbmst.2019.022.
- Dresel A., Teipel U. Jet Dispersion of Multiwall Carbon Nanotubes and Correlation with Suspension Rheology // Chemical Engineering Technology. 2020. Vol. 43. Iss. 5 (Special Issue: Particle and Powder Technology: PARTEC 2019). P. 869–878. DOI: 10.1002/ceat.201900534.
- 6. Corker A. Formulation and Rheology of Carbon-based Materials for Printing of Conductive Three-dimensional Structures: PhD Thesis. University of Liverpool, 2022. 193 p.
- Шрамм Г. Основы практической реологии и реометрии / пер. с англ. И. А. Лавыгина под ред. В. Г. Куличихина. М.: КолосС, 2003. 312 с.
- 8. Barnes H. A. A Handbook of Elementary Rheology. Institute of Non-Newtonian Fluid Mechanics. Aberystwyth: University of Wales, Cambrian Printers, 2000. 201 p.
- Woo D. K., Kim B. C., Lee S. J. Preparation and rheological behavior of polystyrene/multiwalled carbon nanotube composites by latex technology // Korea-Australia Rheology Journal. 2009. Vol. 21. No. 3. P. 185–191.
- 10. Кирсанов Е. А., Матвеенко В. Н. Вязкость и упругость структурированных жидкостей: монография. М.: Техносфера, 2022. 284 с.

REFERENCES

- 1. Ma A., Chinesta F., Mackley M. Rheological modeling of carbon nanotube aggregate suspensions. In: *Journal of Rheology*, 2009, vol. 52, iss. 6, pp. 1311–1330. DOI: 10.1122/1.2982932.
- Ma A. W. K., Yearsley K. M., Chinesta F., Mackley M. R. A review of the microstructure and rheology of carbon nanotube suspensions. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part N: Journal of Nanoengineering and Nanosystems*, 2009, vol. 222, iss. 3, pp. 71–94. DOI: 10.1243/17403499JNN153.
- Lahlou S., Sehaqui R., Lahlou N. Thermal transfer of Nanofluids based on carbon nanotubes/glycerol and study of their rheological behavior. In: *MATEC Web of Conferences*, 2019, vol. 286: 14th Congress of Mechanics (CMM2019), article number: 08003. DOI: 10.1051/matecconf/201928608003.
- 4. Skripkiunas G., Karpova E., Bendoraitiene J., Barauskas I., Drochytka R. Degree of MWCNT suspension dispersity and its influence on rheology of cement pastes. In: Selected papers of the 13th International Conference "Modern building materials, structures and

techniques" (MBMST 2019, 16–17 May 2019, Vilnius, Lithuania). Vilnus, Vilnus Gediminas Technical University, 2019, pp. 166–174. DOI: 10.3846/mbmst.2019.022.

- Dresel A., Teipel U. Jet Dispersion of Multiwall Carbon Nanotubes and Correlation with Suspension Rheology. In: *Chemical Engineering Technology*, 2020, vol. 43, iss. 5 (Special Issue: Particle and Powder Technology: PARTEC 2019), pp. 869–878. DOI: 10.1002/ceat.201900534.
- 6. Corker A. Formulation and Rheology of Carbon-based Materials for Printing of Conductive Three-dimensional Structures: PhD Thesis. University of Liverpool, 2022. 193 p.
- 7. Shramm G. A Practical Approach to Rheology and Rheometry (Rus. ed.: Lavygin I. A., transl., Kulichikhin V. G., ed. Osnovy prakticheskoy reologii i reometrii. Moscow, KolosS Publ., 2003. 312 p).
- 8. Barnes H. A. A Handbook of Elementary Rheology. Institute of Non-Newtonian Fluid Mechanics. Aberystwyth, University of Wales, Cambrian Printers, 2000. 201 p.
- 9. Woo D. K., Kim B. C., Lee S. J. Preparation and rheological behavior of polystyrene/multiwalled carbon nanotube composites by latex technology. In: *Korea-Australia Rheology Journal*, 2009, vol. 21, no. 3, pp. 185–191.
- 10. Kirsanov Ye. A., Matveyenko V. N. *Vyazkost' i uprugost' strukturirovannykh zhidkostey* [Viscosity and elasticity of structured liquids]. Moscow, Tekhnosfera Publ., 2022. 284 p.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Вековищев Михаил Петрович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики и химии Государственного социально-гуманитарного университета; e-mail: mpv.71@mail.ru

Кирсанов Евгений Александрович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики и химии Государственного социально-гуманитарного университета; e-mail: Kirsanov47@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Mikhail P. Vekovishchev- Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Physics and Chemistry, State University of Humanities and Social Studies; e-mail: mpv.71@mail.ru

Evgeny A. Kirsanov–Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Physics and Chemistry, State University of Humanities and Social Studies; e-mail: Kirsanov47@mail.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Вековищев М. П., Кирсанов Е. А. Вязкоупругость углеродных нанотрубок в полимерной матрице // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. № 1. С. 6–19.

DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-6-19.

FOR CITATION

Vekovishchev M. P., Kirsanov E. A. Viscoelasticity of carbon nanotubes in a polymer matrix. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2024, no. 1, pp. 6–19. DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-6-19. УДК 577.3 DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-20-32

РЕГИСТРАЦИЯ АКТИВНОСТИ ЕДИНИЧНЫХ МОЛЕКУЛ АСПАРАГИНАЗЫ С ПОМОЩЬЮ НАНОПОРОВОГО ДЕТЕКТОРА

Иванов Ю. Д.^{1.2}, Аблеев А. Н.¹, Шумянцева В. В.¹, Жданов Д. Д.¹, Покровская М. В.¹, Александрова С. С.¹, Иванова И. А.¹, Виноградова А. В.¹, Неведрова Е. Д.¹, Зиборов В. С.^{1.2}, Ваулин Н. В.³, Лебедев Д. В.³, Букатин А. С.³, Мухин И. С.³, Арчаков А. И.¹

¹ Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича 119121, г. Москва, ул. Погодинская, д. 10, стр. 8, Российская Федерация

² Объединённый институт высоких температур Российской академии наук 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, Российская Федерация

³ Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук 194021, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, д. 8, корп. 3, литер А, Российская Федерация

Аннотация

Цель. Изучить возможность использования нанопор для мониторинга функционирования аспарагиназы.

Процедура и методы. В работе была сконструирована нанопора на базе SiN, в которую встраивали молекулу L-аспарагиназы. Мониторинг каталитической активности встроенной в нанопору единичной молекулы L-аспарагиназы осуществляли, наблюдая за изменением ионного тока в ячейке с этой нанопорой. Этот подход полезен для исследования каталитической активности на базе встроенных в нанопору единичных молекул ферментов.

Результаты. Был создан нанопоровый детектор для исследования активности аспарагиназы. Было получено, что этот детектор позволял проводить мониторинг активности этого фермента в реальном времени без использования меток.

Теоретическая и/или практическая значимость. Показано, что нанопоровый детектор, с размером нанопоры порядка 6 нм, может быть использован для исследования активности аспарагиназы. При этом возможно проводить в реальном времени контроль изменения формы аспарагиназы, который заключается в контроле изменения тока проводимости, проходящего через нанопору, в котором была иммобилизована аспарагиназа. Полученные результаты могут быть полезны при анализе работы ферментов на уровне единичных молекул с помощью нанопорового детектора.

Ключевые слова: нанопора, аспарагиназа, аспарагин, каталитическая активность *Благодарности.* Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований в Российской Федерации на долгосрочный период (2021–2030 годы)

[©] СС ВҮ Иванов Ю. Д., Аблеев А. Н., Шумянцева В. В., Жданов Д. Д., Покровская М. В., Александрова С. С., Иванова И. А., Виноградова А. В., Неведрова Е. Д., Зиборов В. С., Ваулин Н. В., Лебедев Д. В., Букатин А. С., Мухин И. С., Арчаков А. И., 2024.



(№ 122030100168-2). Авторы выражают благодарность ОИВТ РАН за подготовку образцов. Работа по подготовке образцов была финансово поддержана за счёт субсидий на выполнение государственного задания № 075-01056-22-02.

REGISTRATION OF ASPARAGINASE SINGLE MOLECULE ACTIVITY USING A NANOPORE DETECTOR

Yu. Ivanov², A. Ableev¹, V. Shumyantseva¹, D. Zhdanov¹, M. Pokrovskaya¹, S. Aleksandrova¹, I. Ivanova¹, A. Vinogradova¹, E. Nevedrova¹, V. Ziborov², N. Vaulin³, D. Lebedev³, A. Bukatin³, I. Mukhin², A. Archakov¹

¹ Institute of Biomedical Chemistry ulitsa Pogodinskaya 10 build. 8, Moscow 119121, Russian Federation

² Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences ulitsa Izhorskaya 13, Moscow 125412, Russian Federation

³ Alferov Federal State Budgetary Institution of Higher Education and Science Saint Petersburg National Research Academic University of the Russian Academy of Sciences ulitsa Khlopina 8 build. 3 letter A, St. Petersburg 194021, Russian Federation

Abstract

Aim. The possibility of using a nanopore to monitor the functioning of asparaginase has been studied.

Methodology. In this work, a SiN-based nanopore was constructed in which the L-asparaginase molecule was embedded.

The catalytic activity of the L-asparaginase molecule, embedded in the nanopore, has been monitored by observing the change in the ion current in the cell with this nanopore. This approach is useful for studying the catalytic activity based on single enzyme molecules embedded in a nanopore.

Results. A nanopore detector for studying the catalytic activity of L-asparaginase has been developed. It has been found that this detector made it possible to monitor the activity of this enzyme.

Research implications. It has been shown that a nanopore detector, with a nanopore size of the order of 6 nm, can be used to study the activity of asparaginase. It is possible to carry out real-time monitoring of changes in the form of L-asparaginase, which consisted in monitoring changes in the ion current passing through a nanopore, in which asparaginase was immobilized. The results obtained can be of use in the analysis of the functioning of enzymes at the level of single molecules.

Keywords: nanopore, asparaginase, asparagine, catalytic activity

Acknowledgments. The work was carried out within the framework of the Program for Basic Scientific Research in the Russian Federation for the long-term period (2021–2030) (No. 122030100168-2). The authors express their gratitude to the Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences for preparing the samples. The sample preparation work was financially supported by subsidies for the implementation of state assignment No. 075-01056-22-02.

Введение

L-аспарагиназа принадлежит к ферментам класса гидролаз, который катализирует гидролиз L-аспарагина с образованием L-аспарагиновой кислоты и иона аммония. Этот фермент при внутривенном введении в организм человека аспарагина концентрацию крови. снижает В Этот фермент имеет противоопухолевую активность И является частью комбинированной противоопухолевой терапии острого лимфобластного лейкоза (ОПЛ) у детей и взрослых [1]. Для лечения ОПЛ используют только L-аспарагиназу II типа, поскольку L-аспарагиназа I типа не обладает терапевтической активностью [2]. Сродство к аспарагину аспарагиназы II типа составляет Км~10⁻². Этот фермент гомотетрамером с молекулярной массой порядка является 140 кДа, гомотетрамер которого состоит из мономеров массой 36 кДа [3]. Два мономера аспарагиназы соединены между собой в два димера, которые объединяются и образуют тетрамер [3; 4]. Фермент может существовать без субстрата в открытом состоянии, которое при связывании с субстратом переходит в закрытое. После чего реакция идёт в две стадии. Нуклеофильный треонин, расположенный вблизи активного центра фермента, взаимодействует с карбонильной группой аспарагина с образованием промежуточного продукта ацил-фермента. При этом от субстрата отщепляется молекула аммиака. Затем ацил-фермент реагирует с молекулой воды с освобождением L-аспарагиназы и образованием аспартата [5]. L-аспарагиназа может функционировать при pH= 5-10 [6].

Известно, что каталитическая активность фермента, определяемая стандартными методами в биохимии, является величиной усреднённой. В последнее время начала развиваться наука под названием «Энзимология единичных молекул», которая позволяет измерять активность единичных молекул фермента. Основным инструментом для измерения единичной активности молекул ферментов являлась атомно-силовая микроскопия [7; 8; 9]. Этим методом можно было измерять активность ферментов по мониторингу изменения высоты фермента в процессе каталитического цикла. Однако этот метод достаточно трудоёмкий и времязатратный.

В последнее время началось использование нанопоровой технологии как метода детекции единичных молекул фермента, который измеряет ионный ток, возникающий при функционировании фермента, вблизи нанопоры [10; 11]. Работа нескольких ферментов из семейства протеаз таких, как HIV-1 протеаза [11], трипсин [12] и ринин протеаза [13], были детектированы при измерении транслокации расщеплённых пептидов через нанопору. При этом измерялся ионный ток, изменяющийся при функционировании ферментов. Однако описанный выше подход использовал мембранную пору, сформированную из белков, что затрудняет использование нанопоровой технологии для анализа ферментов широкого класса из-за того, что размеры нанопоры определяются исключительно размерами нанопоровой структуры, образованной этими белками, также чувствительными к концентрациям буфера, величине pH и другим условиям [14; 15]. Наиболее перспективным направлением в нанопоровой технологии для исследования активности фермента является технология, на базе использования твердотельной нанопоры с диаметром поры порядка 5 нм [16]. Твердотельная нанопора может быть сконструирована с помощью различных методов, таких как сфокусированный ионный пучок (ФИБ) [16], управляемый пробой диэлектрика (SDB) [17; 18], и электронно-лучевое просверливание (electronbeam drilling EBD) [19]. Si_x-N_y является часто используемым материалом для создания нанопоры.

В нашей работе мы использовали для изготовления нанопорового детектора технологию EBD в SiN. В качестве кюветы была использована измерительная ячейка, разделённая на две части и в эту разделительную пластинку была вмонтирована SiN нанопора. В эту нанопору был встроен фермент аспарагиназы. К двум частям кюветы было приложено напряжение, и регистрировался ток, протекающий через эту нанопору. Было получено, что при функционировании фермента наблюдается открытие нанопоры. Полученные результаты могут быть полезны при исследовании ферментативных реакций на уровне единичных молекул ферментов, а также при создании устройств в терапевтических целях.

Материалы и методы

<u>Реактивы</u>

Буфер PBSD, pH 7.6, C = 1 mM, бидистиллированная деионизованная вода, полученная на установке Millipore (18.2 MoM).

L-аспарагин моногидрат был получен НПП НПП «ПанЭко» (Россия). Для приготовления раствора аспарагина, полученный аспарагин был растворен в 1 mM PBSD до концентрации 10⁻⁵ моль/л, после чего был подогрет до температуры 90°C в течение 3 минут, а затем был перемешан с помощью мешалки Vortex в течение 2 минут.

L-asparaginase *E. carotovora* была клонирована и очищена в лаборатории медицинской биотехнологии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Орехович (ИБМХ) согласно предварительно описанным протоколам [20] и разведена в 1 мМ PBSD буфере до концентраций 10⁻⁹, 10⁻⁸, 10⁻⁷ М.

Нанопоровый детектор

Нанопоровый детектор представлял из себя измерительную ячейку из материала PDMS, разделённую пополам перемычкой, куда вставлялся чип с единичной нанопорой SiN. Диаметр нанопоры составлял порядка 6 нм, толщина нанопоры составляла порядка 40 нм. Изготовление нанопоры проводилось с электронного пучка, образованного использованием с помощью высокоразрешающего TEM (JEM 2100f). Для изготовления нанопорового детектора нанопора была вставлена в специальное крепёжное место и промыта бидистиллированной деионизованной непосредственно водой перед измерениями.

Два резервуара измерительной ячейки заполнялись объёмом 700 мкл (транси цис-) буферного раствора 1 mM PBSD (pH 7.6). Ag/AgCl электроды были встроены в два резервуара измерительной ячейки для записи ионного тока, проходящего через нанопору. Нанопоровый детектор был помещён в ячейку Фарадея для уменьшения электростатических наводок. Для измерений тока через нанопору использовали патч-кламп усилитель с уровнем собственного токового шума 0,3 фА. в полосе частот 1000 Гц. Напряжение изменялось в пределах от -300 до 300 мВ. Регистрация сигнала от нанопоры проводилась с частотой 10 кГц с помощью 16-разрядного АЦП. Далее сигнал подвергался цифровой фильтрации с помощью низкочастотного фильтра Баттерфорта с частотой среза 1000 Гц. При необходимости, после измерения чип промывался дистиллированной водой для удаления остатков соли и снова инсталлировался в измерительную ячейку.

Эксперимент

Непосредственно перед измерениями чип промывался бидистиллированной деионизованной водой, после чего в обе стороны измерительной ячейки вносился 1 mM PBSD буфер и записывался нулевой сигнал около -100 пA(1) (см. рис. 1).



Рис. 1 / Fig. 1. Зависимость ионного тока от времени при напряжении U=-200 мВ. Добавление 1 mM PBSD буфера (1), добавление в цис-камеру аспарагиназы 10⁻⁷ M (2), добавление в цис-камеру аспарагина $C_M = 10^{-5}$ M (3). Измерения были проведены в 1 mM PBSD pH 7.8 / Dependence of ion current on time at voltage U=-200 mV. Adding 1 mM PBSD buffer (1), adding 10-7 M asparaginase to the cis-chamber (2), adding CM = 10-5 M asparagine to the cis-chamber (3). Measurements were carried out in 1 mM PBSD pH 7.8 Источник: по данным авторов

_24 /

После этого, выдержав время около 400 сек, в цис-камеру добавлялся раствор аспарагиназы при концентрации 10⁻⁷ М (2). При этом наблюдали понижение проводимости нанопоры практически до 0. После этого добавляли раствор аспарагина в цис-камеру в концентрации C= 10⁻⁵ М. При этом наблюдалось открытие нанопоры. Это происходило, вероятно, за счёт того, что аспарагиназа в процессе функционирования изменяла свою структуру, позволяя проходить току через нанопору, которую до этого она закрывала.

Обсуждение

В работе было получено, что при добавлении аспарагиназы в ячейку при повышении её концентрации до 10⁻⁷ М в ячейке наблюдается понижение тока, протекающего через нанопору. Это означает, что при этой концентрации аспарагиназа закрывает пору, что приводит к понижению протекающего через пору тока. Затем проводилось добавление аспарагина, который является субстратом аспарагиназы в транс-ячейку. Это приводило к тому, что аспарагиназа начинала функционировать и изменять свою структуру, при этом приоткрывая нанопору, что позволяло увеличиваться току, проходящему через нанопору из цис- в транс-часть кюветы. Кроме этого, были проведены контрольные эксперименты по добавлению аспарагина в цис-часть кюветы в отсутствии аспарагиназы в кювете, при этом не наблюдая существенного изменения сигнала.

Таким образом, в работе удалось наблюдать функционирование аспарагиназы в присутствии аспарагина, причём когда аспарагиназа вначале закрывала нанопору, не давая проходить току из цис- в транс-часть измерительной ячейки. Полученные результаты важны для создания новой системы регистрации функциональной активности аспарагиназы на уровне единичных молекул этого фермента.

Заключение

В работе была исследована возможность использования нанопоры для исследования аспарагиназы в процессе её каталитического цикла. Было показано, что нанопоровый детектор с размером нанопоры порядка 6 нм может быть использован для исследования активности аспарагиназы. При этом возможно проводить в реальном времени контроль изменения формы аспарагиназы, который заключался в мониторинге изменения ионного тока, проходящего через нанопору, в которой была иммобилизована аспарагиназа. Полученные результаты могут быть полезны при анализе работы ферментов на уровне единичных молекул с помощью нанопорового детектора.

Статья поступила в редакцию 01.11.2023 г.

ЛИТЕРАТУРА

- L-asparaginase: a promising chemotherapeutic agent / Verma N., Kumar K., Kaur G., Anand S. // Critical reviews in biotechnology. 2007. Vol. 27. Iss. 1. P. 45–62. DOI: 10.1080/07388550601173926.
- L-asparaginase / Whitecar J. P. Jr, Bodey G. P., Harris J. E., Freireich E. J. // The New England Journal of Medicine. 1970. Vol. 282. No. 13. P. 732–734. DOI: 10.1056/NEJM197003262821307.
- 3. Kozak M., Jurga S. A comparison between the crystal and solution structures of Escherichia coli asparaginase II // Acta Biochimica Polonica. 2002. Vol. 49. No. 2. P. 509–513.
- 4. Crystal structure of Escherichia coli L-asparaginase, an enzyme used in cancer therapy / Swain A. L., Jaskólski M, Housset D, Rao J. K, Wlodawer A. // Proceedings of the National Academy of Sciences. 1993. Vol. 90. no. 4. P. 1474–1478. DOI: 10.1073/pnas.90.4.1474.
- A covalently bound catalytic intermediate in Escherichia coli asparaginase: Crystal structure of a Thr-89-Val mutant / Palm G. J., Lubkowski J., Derst C., Schleper S., Röhm K. H., Wlodawer A. // FEBS Letters. 1996. Vol. 390. No. 2. P. 211–216. DOI: 10.1016/0014-5793(96)00660-6.
- 6. Исследование вторичной структуры L-аспарагиназы в широком интервале значений рН / Илларионова И. Г., Петров Л. И., Олейникова Л. В., Рощин С. Н., Пасечник В. А., Халяпин Б. Д., Полоцкий А. Е., Воинова Н. Е., Штукина Т. Б. // Молекулярная Биология. 1980. Т. 14. № 4. С. 951–955.
- 7. АСМ-визуализация, измерение активности и физико-химических свойств единичных мономеров и олигомеров ферментов / Иванов Ю. Д. Бухарина Н. С., Плешакова Т. О., Французов П. А., Крохин Н. В., Зиборов В. С., Арчаков А. И. // Биофизика. 2011. Т. 56. № 5. С. 939–944.
- АСН-нанотехнология для визуализации, счёта, определения упругости и активности единичных белков цитохром Р 450-содержащих монооксигеназных систем / Иванов Ю. Д., Бухарина Н. С., Французов П. А., Плешакова Т. О., Мунро А. В., Хуэй Бон Хоа Г., Арчаков А. И. // Нанотехнологии и охрана здоровья. 2010. Т. 2. № 1. С. 30– 35.
- 9. Direct observation of enzyme activity with the atomic force microscope / Radmacher M., Fritz M., Hansma H. G., Hansma P. K. // Science. 1994. Vol. 265. No. 5178. P. 1577–1579. DOI: 10.1126/science.8079171.
- A nanopore approach for analysis of caspase-7 activity in cell lysates / Pham B., Eron S. J., Hill M. E., Li X., Fahie M. A., Hardy J. A., Chen M. // Biophysical Journal. 2019. Vol. 117. No. 5. P. 844–855. DOI: 10.1016/j.bpj.2019.07.045.
- Real-time label-free measurement of HIV-1 protease activity by nanopore analysis / Wang L., Han Y., Zhou S., Guan X. // Biosensors and Bioelectronics. 2014. Vol. 62. P. 158– 162. DOI: 10.1016/j.bios.2014.06.041.
- Label-free nanopore single-molecule measurement of trypsin activity / Zhou S., Wang L., Chen X, Guan X. // ACS Sensors. 2016. Vol. 1. No. 5. P. 607–613. DOI: 10.1021/acssensors.6b00043.
- Kukwikila M., Howorka S. Nanopore-based electrical and label-free sensing of enzyme activity in blood serum // Analytical Chemistry. 2015. Vol. 87. No. 18. P. 9149–9154. DOI: 10.1021/acs.analchem.5b01764.
- Translocation of double-stranded DNA through membrane-adapted phi29 motor protein nanopores / Wendell D., Jing P., Geng J., Subramaniam V., Lee T. J., Montemagno C., Guo P. // Nature Nanotechnology. 2009. Vol. 4. No. 11. P. 765–772. DOI: 10.1038/nnano.2009.259.

ISSN 2949-5083

- 15. An engineered ClyA nanopore detects folded target proteins by selective external association and pore entry / Soskine M., Biesemans A., Moeyaert B., Cheley S., Bayley H., Maglia G. // Nano letters. 2012. Vol. 12. No. 9. P. 4895–4900. DOI: 10.1021/nl3024438.
- Ion-beam sculpting at nanometre length scales / Li J., Stein D., McMullan C., Branton D. Aziz M. J., Golovchenko J. A. // Nature. 2001. Vol. 412. No. 6843. P. 166–169. DOI: 10.1038/35084037.
- Kwok H., Briggs K., Tabard-Cossa V. Nanopore fabrication by controlled dielectric breakdown // PLOS ONE. 2014. Vol. 9. Iss. 3. P. e92880. DOI: 10.1371/journal.pone.0092880.
- Solid-state nanopore fabrication by automated controlled breakdown / Waugh M., Briggs K., Gunn D., Gibeault M., King S., Ingram Q., Jimenez A. M., Berryman S., Lomovtsev D., Andrzejewski L., Tabard-Cossa V. // Nature Protocols. 2020. Vol. 15. No. 1. P. 122–143. DOI: 10.1038/s41596-019-0255-2.
- Ionic field effect transistors with sub-10 nm multiple nanopores / Nam S.-W., Rooks M. J., Kim K.-B., Rossnagel S. M. // Nano letters. 2009. Vol. 9. No. 5. P. 2044–2048. DOI: 10.1021/nl900309s.
- 20. Structural and functional insights into Erwinia carotovora l-asparaginase / Papageorgiou A. C., Posypanova G. A., Andersson C. S., Sokolov N. N., Krasotkina J. // The FEBS Journal. 2008. Vol. 275. Iss. 17. P. 4306–4316.

REFERENCES

- 1. Verma N., Kumar K., Kaur G., Anand S. L-asparaginase: a promising chemotherapeutic agent. In: *Critical reviews in biotechnology*, 2007, vol. 27, iss. 1, pp. 45–62. DOI: 10.1080/07388550601173926.
- Whitecar J. P. Jr, Bodey G. P., Harris J. E., Freireich E. J. L-asparaginase. In: *The New England Journal of Medicine*, 1970, vol. 282, no. 13, pp. 732–734. DOI: 10.1056/NEJM197003262821307.
- 3. Kozak M., Jurga S. A comparison between the crystal and solution structures of Escherichia coli asparaginase II. In: *Acta Biochimica Polonica*, 2002, vol. 49, no. 2, pp. 509–513.
- 4. Swain A. L., Jaskólski M, Housset D, Rao J. K, Wlodawer A. Crystal structure of Escherichia coli L-asparaginase, an enzyme used in cancer therapy. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 1993, vol. 90, no. 4, pp. 1474–1478. DOI: 10.1073/pnas.90.4.1474.
- Palm G. J., Lubkowski J., Derst C., Schleper S., Röhm K. H., Wlodawer A. A covalently bound catalytic intermediate in Escherichia coli asparaginase: Crystal structure of a Thr-89-Val mutant. In: *FEBS Letters*, 1996, vol. 390, no. 2, pp. 211–216. DOI: 10.1016/0014-5793(96)00660-6.
- Illarionova I. G., Petrov L. I., Oleynikova L. V., Roshchin S. N., Pasechnik V. A., Khalyapin B. D., Polotskiy A. Ye., Voinova N. Ye., Shtukina T. B. [Study of the secondary structure of L-asparaginase in a wide range of pH values]. In: *Molekulyarnaya Biologiya* [Molecular Biology], 1980, vol. 14, no. 4, pp. 951–955.
- Ivanov Yu. D. Bukharina N. S., Pleshakova T. O., Frantsuzov P. A., Krokhin N. V., Ziborov V. S., Archakov A. I. [Atomic force microscopy visualization and measurement of the activity and physicochemical properties of single monomeric and oligomeric enzymes]. In: *Biofizika* [Biophysics], 2011, vol. 56, no. 5, pp. 939–944.
- 8. Ivanov Yu. D., Bukharina N. S., Frantsuzov P. A., Pleshakova T. O., Munro A. V., Hui Bon Hoa G., Archakov A. I. [ASN nanotechnology for visualization, counting, determination of elasticity and activity of single proteins of cytochrome P 450-containing monooxygenase

systems]. In: *Nanotekhnologii i okhrana zdorov'ya* [Nanotechnologies and health care], 2010, vol. 2, no. 1, pp. 30–35.

- 9. Radmacher M., Fritz M., Hansma H. G., Hansma P. K. Direct observation of enzyme activity with the atomic force microscope. In: *Science*, 1994, vol. 265, no. 5178, pp. 1577–1579. DOI: 10.1126/science.8079171.
- Pham B., Eron S. J., Hill M. E., Li X., Fahie M. A., Hardy J. A., Chen M. A nanopore approach for analysis of caspase-7 activity in cell lysates. In: *Biophysical Journal*, 2019, vol. 117, no. 5, pp. 844–855. DOI: 10.1016/j.bpj.2019.07.045.
- Wang L., Han Y., Zhou S., Guan X. Real-time label-free measurement of HIV-1 protease activity by nanopore analysis. In: *Biosensors and Bioelectronics*, 2014, vol. 62, pp. 158–162. DOI: 10.1016/j.bios.2014.06.041.
- Zhou S., Wang L., Chen X, Guan X. Label-free nanopore single-molecule measurement of trypsin activity. In: ACS Sensors, 2016, vol. 1, no. 5, pp. 607–613. DOI: 10.1021/acssensors.6b00043.
- Kukwikila M., Howorka S. Nanopore-based electrical and label-free sensing of enzyme activity in blood serum. In: *Analytical Chemistry*, 2015, vol. 87, no. 18, pp. 9149–9154. DOI: 10.1021/acs.analchem.5b01764.
- Wendell D., Jing P., Geng J., Subramaniam V., Lee T. J., Montemagno C., Guo P. Translocation of double-stranded DNA through membrane-adapted phi29 motor protein nanopores. In: *Nature Nanotechnology*, 2009, vol. 4, no. 11, pp. 765–772. DOI: 10.1038/nnano.2009.259.
- Soskine M., Biesemans A., Moeyaert B., Cheley S., Bayley H., Maglia G. An engineered ClyA nanopore detects folded target proteins by selective external association and pore entry. In: *Nano letters*, 2012, vol. 12, no. 9, pp. 4895–4900. DOI: 10.1021/nl3024438.
- 16. Li J., Stein D., McMullan C., Branton D. Aziz M. J., Golovchenko J. A. Ion-beam sculpting at nanometre length scales. In: *Nature*, 2001, vol. 412, no. 6843, pp. 166–169. DOI: 10.1038/35084037.
- Kwok H., Briggs K., Tabard-Cossa V. Nanopore fabrication by controlled dielectric breakdown. In: *PLOS ONE*, 2014, vol. 9, iss. 3, pp. e92880. DOI: 10.1371/journal.pone.0092880.
- Waugh M., Briggs K., Gunn D., Gibeault M., King S., Ingram Q., Jimenez A. M., Berryman S., Lomovtsev D., Andrzejewski L., Tabard-Cossa V. Solid-state nanopore fabrication by automated controlled breakdown. In: *Nature Protocols*, 2020, vol. 15, no. 1, pp. 122–143. DOI: 10.1038/s41596-019-0255-2.
- Nam S.-W., Rooks M. J., Kim K.-B., Rossnagel S. M. Ionic field effect transistors with sub-10 nm multiple nanopores. In: *Nano letters*, 2009, vol. 9, no. 5, pp. 2044–2048. DOI: 10.1021/nl900309s.
- Papageorgiou A. C., Posypanova G. A., Andersson C. S., Sokolov N. N., Krasotkina J. Structural and functional insights into Erwinia carotovora L-asparaginase. In: *The FEBS Journal*, 2008, vol. 275, iss. 17, pp. 4306–4316.

_28 /

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Иванов Юрий Дмитриевич – доктор биологических наук, профессор, заведующий лабораторией нанобиотехнологии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича; ведущий научный сотрудник лаборатории № 6.2. – ударно-волновых воздействий Объединённого института высоких температур Российской академии наук; e-mail: Yurii.ivanov.nata@gmail.com

Аблеев Александр Нарманович – ведущий инженер лаборатории нанобиотехнологии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича; e-mail: ableev@mail.ru

Шумянцева Виктория Васильевна – доктор биологических наук, профессор, заведующий лабораторией биоэлектрохимии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича; e-mail: v_shumyantseva@mail.ru

Жданов Дмитрий Дмитриевич – доктор биологических наук, профессор, заведующий лабораторией медицинской биотехнологии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича; e-mail: zhdanovdd@mail.ru

Покровская Марина Владимировна – кандидат биологических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории медицинской биотехнологии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича; e-mail: zhdanovdd@mail.ru

Александрова Светлана Серебеджановна – кандидат биологических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории медицинской биотехнологии Научноисследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича; e-mail: zhdanovdd@mail.ru

Иванова Ирина Александровна – младший научный сотрудник лаборатории нанобиотехнологии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича; e-mail: i.a.ivanova@bk.ru

Виноградова Ангелина Владимировна – младший научный сотрудник лаборатории нанобиотехнологии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича; e-mail: angeluna1234@bk.ru

Неведрова Екатерина Дмитриевна – младший научный сотрудник лаборатории нанобиотехнологии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича; e-mail: nevedrova.kat@yandex.ru

Зиборов Вадим Серафимович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории № 6.2. – ударно-волновых воздействий Объединённого института высоких температур Российской академии наук; ведущий специалист лаборатории нанобиотехнологии Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича; e-mail: ziborov.vs@yandex.ru

Ваулин Никита Васильевич – аспирант по направлению «Физика полупроводников», лаборант лаборатории возобновляемых источников энергии Санкт-Петербургского национального исследовательского Академического университета имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук; e-mail: denis.v.lebedev@gmail.com

Лебедев Денис Владимирович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Санкт-Петербургского национального исследовательского Академического университета имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук; e-mail: denis.v.lebedev@gmail.com

Букатин Антон Сергеевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры нанобиотехнологий, старший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Санкт-Петербургского национального исследовательского Академического университета имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук; e-mail: denis.v.lebedev@gmail.com

Мухин Иван Сергеевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией возобновляемых источников энергии Санкт-Петербургского национального исследовательского Академического университета имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук; e-mail: denis.v.lebedev@gmail.com

Арчаков Александр Иванович – Академик РАН, доктор биологических наук, профессор, научный руководитель Научно-исследовательского института биомедицинской химии имени В. Н. Ореховича; e-mail: archak@ibmc.msk.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Yuriy D. Ivanov – Dr. Sci. (Biology), Prof., Laboratory Head, Laboratory of Nanobiotechnology, Institute of Biomedical Chemistry; Leading Researcher, Laboratory No. 6.2. – Shock Wave Effects, Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences; e-mail: Yurii.ivanov.nata@gmail.com

Aleksandr N. Ableev – Leading Engineer, Laboratory of Nanobiotechnology, Institute of Biomedical Chemistry; e-mail: ableev@mail.ru

Viktoriya V. Shumyantseva – Dr. Sci. (Biology), Prof., Laboratory Head, Laboratory of Bioelectrochemistry, Institute of Biomedical Chemistry; e-mail: v_shumyantseva@mail.ru

Dmitry D. Zhdanov – Dr. Sci. (Biology), Prof., Laboratory Head, Laboratory of Medical Biotechnology, Institute of Biomedical Chemistry; e-mail: zhdanovdd@mail.ru

Marina V. Pokrovskaya – Cand. Sci. (Biology), Leading Researcher, Laboratory of Medical Biotechnology, Institute of Biomedical Chemistry; e-mail: zhdanovdd@mail.ru

Svetlana S. Aleksandrova – Cand. Sci. (Biology), Leading Researcher, Laboratory of Medical Biotechnology, Institute of Biomedical Chemistry; zhdanovdd@mail.ru

Irina A. Ivanova – Research Assistant, Laboratory of Nanobiotechnology, Institute of Biomedical Chemistry; e-mail: i.a.ivanova@bk.ru

Angelina V. Vinogradova – Research Assistant, Laboratory of Nanobiotechnology, Institute of Biomedical Chemistry; e-mail: angeluna1234@bk.ru

Ekaterina D. Nevedrova – Research Assistant, Laboratory of Nanobiotechnology, Institute of Biomedical Chemistry; e-mail: nevedrova.kat@yandex.ru

Vadim S. Ziborov – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Laboratory No. 6.2. – Shock Wave Effects, Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences; Leading Specialist, Laboratory of Nanobiotechnology, Institute of Biomedical Chemistry; e-mail: ziborov.vs@yandex.ru

Nikita V. Vaulin – Postgraduate Student, Department "Physics of Semiconductors", Laboratory Assistant, Laboratory of Renewable Energy Sources, Saint Petersburg National Research Academic University named after J. I. Alfyorov, Russian Academy of Sciences; e-mail: denis.v.lebedev@gmail.com

Denis V. Lebedev – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Laboratory of Renewable Energy Sources, Saint Petersburg National Research Academic University named after J. I. Alfyorov, Russian Academy of Sciences; e-mail: denis.v.lebedev@gmail.com

Anton S. Bukatin – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Nanobiotechnologies, Senior Researcher, Laboratory of Renewable Energy Sources, Saint Petersburg National Research Academic University named after J. I. Alfyorov, Russian Academy of Sciences;

e-mail: denis.v.lebedev@gmail.com

Ivan S. Mukhin – Dr. Sci. (Phys.-Math), Prof., Laboratory Head, Laboratory of Renewable Energy Sources, Saint Petersburg National Research Academic University named after J. I. Alfyorov, Russian Academy of Sciences; e-mail: denis.v.lebedev@gmail.com

Aleksaandr I. Archakov – Academician of the Russian Academy of Sciences, Dr. Sci. (Biology), Prof., Scientific Director, Institute of Biomedical Chemistry; e-mail: archak@ibmc.msk.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Регистрация активности единичных молекул аспарагиназы с помощью нанопорового детектора / Иванов Ю. Д., Аблеев А. Н., Шумянцева В. В., Жданов Д. Д., Покровская М. В., Александрова С. С., Иванова И. А., Виноградова А. В., Неведрова Е. Д., Зиборов В. С., Ваулин Н. В., Лебедев Д. В., Букатин А. С., Мухин И. С., Арчаков А. И. // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. № 1. С. 20–32.

DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-20-32.

FOR CITATION

Yu. D. Ivanov, A. N. Ableev, V. V. Shumyantseva, D. D. Zhdanov, M. V. Pokrovskaya, S. S. Aleksandrova, I. A. Ivanova, Vinogradoval A. E., E. D. Nevedrova, V. S. Ziborov, N. V. Vaulin, D. V. Lebedev, A. S. Bukatin, I. S. Mukhin, A. I. Archakov. Registration of asparaginase single molecule activity using a nanopore detector. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2024, no. 1, pp. 20–32. DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-20-32.

УДК 004.94

DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-33-47

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ПИКСЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ В ЗВУКОВЫЕ ОТОБРАЖЕНИЯ. Часть 2

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 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 (ОС). 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 2

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

[©] СС ВҮ Ключников С. А., Калашников Е.В., 2024.

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 a modern OOP programming language and functional libraries has been created that allows you to present the pixel structure of a visual image into an audio display.

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

Рассматривается возможность внесения большего разнообразия в настройку мелодии, полученной с изображения. В программе использовалась одна гармоника Ля минор. Это приводило к тому, что возникало множество подходящих и однотипных композиций [2]. Чтобы разнообразить такую однотипность, необходимо внести изменения в программный компонент кода. Для этого следует разнообразить начальную ноту Ля минор и расширить функционал интервалов. Благодаря этому разнообразие в генерации мелодии станет гораздо шире. Это положительно скажется на уникальности и насыщенности каждой сгенерированной композиции.

1. Расширение возможностей генерации мелодий

Необходимо изменить начальную ноту до Ля минор и расширить диапазон интервалов. Это увеличит возможности для создания мелодии, что сделает каждую сгенерированную композицию более уникальной и насыщенной.

Дня начала настроим процедурную генерацию частоты для любых из вариантов тональности. Для этого сопоставим ноты музыкального инструмента фортепиано с частотами².

```
def get_piano_notes():
     octave = ['C', 'c', 'D', 'd', 'E', 'F', 'f, 'G', 'g', 'A', 'a', 'B']
     base_freq = 440 #Частота A4
     keys = np.array([x+str(y) \text{ for } y \text{ in } range(0,9) \text{ for } x \text{ in } octave])
     start = np.where(keys == 'A0')[0][0]
     end = np.where(keys == 'C8')[0][0]
     keys = keys[start:end+1]
                          dict(zip(keys, [2^{**}((n+1-49)/12)^*base_freq)
     note_freqs
                     =
                                                                                  for
                                                                                               in
                                                                                         n
range(len(keys))]))
     note_freqs["] = 0.0 # stop
     return note_freqs
```

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).

ISSN 2949-5083

Функция, представленная выше, является основной в данном разделе программы, поскольку при помощи функции get_piano_notes можно соответствует набор сопоставлять ноты, которым манипулятивных инструментов (клавиш) на фортепиано [1; 2; 3]. Частота воспроизведения при этом используется в герцах.

note_freqs = get_piano_notes()# загрузка словаря с нотами

Определение интервалов между тонами в гаммах, для индексации нот:

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

Благодаря этому стало возможным находить индекс гаммы в массиве тонов. Данное действие является необходимым, поскольку в дальнейшем потребуется реиндексировать массив, чтобы он начинался с необходимого элемента.

index = scale_intervals.index(whichKey) # определение индекса необходимой клавиши.

new_scale = scale_intervals[index:12] + scale_intervals[:index] # реиндексация элемента для начала с необходимой клавиши.

Таким образом, становится возможным определение гамм и массивов, в котором, в свою очередь, каждому элементу сопоставляется переопределённый массив элементов с индексом:

```
if whichScale == 'AEOLIAN':
    scale = [0, 2, 3, 5, 7, 8, 10]
  elif whichScale == 'BLUES':
    scale = [0, 2, 3, 4, 5, 7, 9, 10, 11]
  elif whichScale == 'PHYRIGIAN':
    scale = [0, 1, 3, 5, 7, 8, 10]
  elif whichScale == 'CHROMATIC':
    scale = [0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11]
  elif whichScale == 'DORIAN':
    scale = [0, 2, 3, 5, 7, 9, 10]
  elif whichScale == 'HARMONIC_MINOR':
    scale = [0, 2, 3, 5, 7, 8, 11]
  elif whichScale == 'LYDIAN':
    scale = [0, 2, 4, 6, 7, 9, 11]
  elif whichScale == 'MAJOR':
    scale = [0, 2, 4, 5, 7, 9, 11]
  elif whichScale == 'MELODIC_MINOR':
    scale = [0, 2, 3, 5, 7, 8, 9, 10, 11]
  elif whichScale == 'MINOR':
    scale = [0, 2, 3, 5, 7, 8, 10]
  elif whichScale == 'MIXOLYDIAN':
    scale = [0, 2, 4, 5, 7, 9, 10]
  elif whichScale == 'NATURAL_MINOR':
    scale = [0, 2, 3, 5, 7, 8, 10]
  elif whichScale == 'PENTATONIC':
```
```
scale = [0, 2, 4, 7, 9]
    else:
      print('Недопустимое имя )
  Также следующим шагом можно определить интервалы для их использования
при создании композиций.
  harmony_select = \{'U0': 1,
              'ST' : 16/15,
              'M2': 9/8,
              'm3': 6/5,
              'M3' : 5/4,
              'P4': 4/3,
              'DT': 45/32,
              'P5': 3/2,
              'm6': 8/5,
              'M6': 5/3.
              'm7': 9/5,
              'M7': 15/8,
              '08': 2
  nNotes = len(scale)#длина гаммы в нотах
  freqs = []#инициализация массива
  for i in range(nNotes):
    note = new_scale[scale[i]] + str(whichOctave)
    freqToAdd = note_freqs[note]
```

```
freqs.append(freqToAdd)
```

2. Модернизация программного компонента с использованием OpenSourse-библиотек языка программирования Python

С учётом всех проведённых операций и привлечением на этом этапе OpenSourse-библиотек³ приходим к конечной форме программы, позволяющей на сетке пикселей преобразование «цвет-звук» [2; 3]:

#Import necessary libraries import streamlit as st import pandas as pd

import numpy as np

```
import cv2
```

import random

from pedalboard import Pedalboard, Chorus, Reverb, Gain, LadderFilter, Phaser, Delay, PitchShift, Distortion

from pedalboard.io import AudioFile

from PIL import Image

³ 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).

```
from scipy.io import wavfile
  import librosa
  import glob
  #Функция генерации частоты в герцах посредством нот
  def get_piano_notes():
     # Верхние и черные клавиши
     octave = ['C', 'c', 'D', 'd', 'E', 'F', 'f', 'G', 'g', 'A', 'a', 'B']
     base_freq = 440 #Частота A4
     keys = np.array([x+str(y) \text{ for } y \text{ in } range(0,9) \text{ for } x \text{ in } octave])
     # Trim to standard 88 keys
     start = np.where(keys == 'A0')[0][0]
     end = np.where(keys == 'C8')[0][0]
     keys = keys[start:end+1]
                       dict(zip(keys, [2^{**}((n+1-49)/12)^*base_freq
     note_freqs
                                                                         for
                                                                                    in
                  =
                                                                               n
range(len(keys))]))
     note_freqs["] = 0.0 # Остановка
     return note_freqs
  #Масштаб выбранный пользователем
  def makeScale(whichOctave, whichKey, whichScale):
     #Загрузка словаря
     note_freqs = get_piano_notes()
     # Определение тональности. Верхний регистр – белые клавиши, нижний
регистр – чёрные клавиши.
     scale_intervals = ['A','a','B','C','c','D','d','E','F','f,'G','g']
     #Поиск индекса ключа
     index = scale_intervals.index(whichKey)
     #Предопределение интервалов шкалы, интервалы должны начинаться с
whichKey
     new_scale = scale_intervals[index:12] + scale_intervals[:index]
     #Выбор масштаба
     if whichScale == 'AEOLIAN':
       scale = [0, 2, 3, 5, 7, 8, 10]
     elif whichScale == 'BLUES':
       scale = [0, 2, 3, 4, 5, 7, 9, 10, 11]
     elif whichScale == 'PHYRIGIAN':
       scale = [0, 1, 3, 5, 7, 8, 10]
     elif whichScale == 'CHROMATIC':
       scale = [0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11]
     elif whichScale == 'DORIAN':
       scale = [0, 2, 3, 5, 7, 9, 10]
     elif whichScale == 'HARMONIC MINOR':
```

```
scale = [0, 2, 3, 5, 7, 8, 11]
  elif whichScale == 'LYDIAN':
    scale = [0, 2, 4, 6, 7, 9, 11]
  elif whichScale == 'MAJOR':
    scale = [0, 2, 4, 5, 7, 9, 11]
  elif whichScale == 'MELODIC_MINOR':
    scale = [0, 2, 3, 5, 7, 8, 9, 10, 11]
  elif whichScale == 'MINOR':
    scale = [0, 2, 3, 5, 7, 8, 10]
  elif whichScale == 'MIXOLYDIAN':
    scale = [0, 2, 4, 5, 7, 9, 10]
  elif whichScale == 'NATURAL MINOR':
    scale = [0, 2, 3, 5, 7, 8, 10]
  elif whichScale == 'PENTATONIC':
    scale = [0, 2, 4, 7, 9]
  else:
    print('Invalid scale name')
  #Инициализации массива
  freqs = []
  for i in range(len(scale)):
    note = new_scale[scale[i]] + str(whichOctave)
    freqToAdd = note_freqs[note]
    freqs.append(freqToAdd)
  return freqs
#Преобразование НUE оттенка в частоту
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

#Создание музыки по изображению

def img2music(img, scale = [220.00, 246.94, 261.63, 293.66, 329.63, 349.23, 415.30],

sr = 22050, T = 0.1, nPixels = 60, useOctaves = True, randomPixels = False, harmonize = 'U0'):

Аргументы:

Аргумент img: (массив) изображение для обработки

Аргумент scale: (массив) массив, содержащий частоты, на которые нужно сопоставить значения Н

Аргумент sr: (int) частота дискретизации, используемая для результирующей композиции

Аргумент Т: (int) время в секундах для пересчёта каждой ноты в песне

Аргумент nPixels: (int) количество пикселей, используемых для создания композиции

Возвращает:

Аргумент song : (array) Numpy массив частот. Может быть воспроизведён с помощью ipd.Audio(song, rate = sr)

```
#Пробование графического изображения в HSV
hsv = cv2.cvtColor(img, cv2.COLOR_RGB2HSV)
#Получение масштаба изображения
height, width, depth = img.shape
i=0; j=0; k=0
```

Инициализация массива, который включает в себя оттенки для каждого пикселя изображения

```
hues = []

if randomPixels == False:

for val in range(nPixels):

hue = abs(hsv[i][j][0]) #This is the hue value at pixel coordinate (i,j)

hues.append(hue)

i+=1

j+=1

else:

for val in range(nPixels):

i = random.randint(0, height-1)

j = random.randint(0, width-1)

hue = abs(hsv[i][j][0]) #Координаты оттенка пикселя (i,j)

hues.append(hue)
```

```
#Создание DataFrame оттенками и частотами
pixels_df = pd.DataFrame(hues, columns=['hues'])
```

```
pixels_df['frequencies']
                                         pixels_df.apply(lambda
                                                                       row
                                 =
                                                                                 :
hue2freq(row['hues'],scale), axis = 1)
    frequencies = pixels_df['frequencies'].to_numpy()
    #Преобразование частоты в ноту
    pixels_df['notes']
                                      pixels df.apply(lambda
                                                                     row
                                                                                 :
librosa.hz_to_note(row['frequencies']), axis = 1)
                                           pixels_df.apply(lambda
    pixels df['midi number']
                                   =
                                                                       row
                                                                                 :
librosa.note_to_midi(row['notes']), axis = 1)
    #Создание словаря гармонии
    #Унисон
                   = U0 ; semitone
                                       = ST ; major second
                                                             = M2
    #Минор 3
                 = m3; major third
                                       = M3; perfect fourth = P4
    #Диатонический тритон = DT ; perfect fifth = P5 ; minor sixth
                                                                      = m6
                  = M6; minor seventh = m7; major seventh = M7
    #Мажор 6
    #Октава
                   = O8
    harmony select = \{'U0': 1,
              'ST' : 16/15,
              'M2' : 9/8,
              'm3': 6/5,
              'M3' : 5/4,
              'P4': 4/3,
              'DT': 45/32,
              'P5': 3/2,
              'm6': 8/5.
              'M6': 5/3,
              'm7': 9/5,
              'M7': 15/8,
              '08': 2
              }
    harmony = np.array([]) #Массив с содержанием гармонии песни
    harmony_val = harmony_select[harmonize] #Соотношение гармонии
    #song_freqs = np.array([]) #Массив с частотами
    song = np.array([])
                          #Сигналы
    octaves = np.array([0.5,1,2])#Переход на октаву выше или ниже
    t = np.linspace(0, T, int(T*sr), endpoint=False) # Переменная – время
    #Создание песни с массивом numpy :]
    #nPixels = int(len(frequencies))#Пиксели в изображении
    for k in range(nPixels):
      if useOctaves:
         octave = random.choice(octaves)
      else:
```

octave = 1

```
if randomPixels == False:
```

val = octave * frequencies[k]

else:

```
val = octave * random.choice(frequencies)
```

#Создание заметок

note = 0.5*np.sin(2*np.pi*val*t) h_note = 0.5*np.sin(2*np.pi*harmony_val*val*t)

#Размещение заметок в массивы

song = np.concatenate([song, note])

harmony = np.concatenate([harmony, h_note])

```
#song_freqs = np.concatenate([song_freqs, val])
```

return song, pixels_df, harmony

Создание заголовка визуализации программы на сайте

st.title("Цвета Ноты")

st.markdown("Это web-приложение превратит изображение в музыкальную композицию")

#Создание выплывающего окна

df1 = pd.DataFrame({'Scale_Choice': ['AEOLIAN', 'BLUES', 'PHYRIGIAN', 'CHROMATIC', 'DORIAN', 'HARMONIC_MINOR', 'LYDIAN', 'MAJOR', 'MELODIC_MINOR', 'MINOR', 'MIXOLYDIAN', 'NATURAL_MINOR', 'PENTATONIC']})

```
df2 = pd.DataFrame({'Keys': ['A','a','B','C','c','D','d','E','F','f,'G','g']})
```

df3 = pd.DataFrame({'Octaves': [1,2,3]})

df4 = pd.DataFrame ({'Harmonies': ['U0','ST','M2','m3','M3','P4','DT','P5','m6','M6','m7','M7','O8']})

st.sidebar.markdown("Выберите образец изображения, если вы хотите использовать одно из предварительно загруженных изображений. Выберите Изображение пользователя, если вы хотите использовать своё собственное изображение.")

_radio = st.sidebar.radio("",("Использовать готовое изображение", "Загрузить собственное изображение"))

sample_images = glob.glob('*.jpg')

samp_imgs_df = pd.DataFrame(sample_images,columns=['Images'])

samp_img = st.sidebar.selectbox('Выберите образец изображения', samp_imgs_df['Images'])

#Загрузка изображения

user_data = st.sidebar.file_uploader(label="Загрузите собственное изображение")

if _radio == "Использовать готовое изображение":

img2load = samp_img

elif _radio == "Загрузить собственное изображение":

img2load = user_data

```
#Отображение картинки
  st.sidebar.image(img2load)
  col1, col2, col3, col4 = st.columns(4)
  with col1:
    scale = st.selectbox('Какой
                                                               использовать?',
                                   жанр вы хотели
                                                          бы
df1['Scale_Choice'])
    'Вы выбрали ' + scale + ' жанр'
  with col2:
    key = st.selectbox('Какой ключ вы хотели бы использовать?', df2['Keys'])
    'Вы выбрали:', key
  with col3:
    octave =
                st.selectbox('Какую октаву вы бы хотели использовать',
df3['Octaves'])
    'Вы выбрали:', octave
  with col4:
    harmony = st.selectbox('Какую гармонию вы хотели бы использовать?',
df4['Harmonies'])
    'Вы выбрали:', harmony
  col5, col6 = st.columns(2)
  with col5:
    #Выбор пользователем случайных пикселей
    random_pixels = st.checkbox('Использовать случайные пиксели для создания
песни?', value=True)
  with col6:
    #Продолжительность песни
    use_octaves = st.checkbox('Использовать случайные октавы нот при
создании песни?', value=True)
  col7, col8 = st.columns(2)
  with col7:
    t_value = st.slider('Длительность ноты', min_value=0.01, max_value=1.0, step =
0.01, value=0.2)
  with col8:
    n_pixels = st.slider('Сколько пикселей вы используете? (Больше пикселей
занимает больше времени)', min_value=12, max_value=320, step=1, value=60)
  st.markdown("## Педалборд")
  col9, col10, col11, col12 = st. columns(4)
  #Параметры хоруса
  with col9:
    st.markdown("### Параметры хоруса")
    rate_hz_chorus = st.slider('Рейдовый фрейм', min_value=0.0, max_value=100.0,
step=0.1, value=0.0)
  #Параметры искажения
  with col10:
```

```
st.markdown("### Параметры искажения")
    delay_seconds = st.slider('Задержка в секундах', min_value=0.0, max_value=2.0,
step=0.1, value=0.0)
  with col11:
    st.markdown("### Параметры искажения")
    drive_db
                =
                     st.slider('Праметры
                                            искажения(дб)',
                                                                min_value=0.0,
max value=100.0, step=1.0, value=0.0)
  # Параметры усиления
  with col12:
    st.markdown("### Параметры усиления")
    gain_db
                     st.slider('Коэффицент
                                              усиления(дб)',
                                                                min_value=0.0,
                =
max_value=100.0, step=1.0, value=0.0)
  st.markdown("### Параметры реверберации")
  rev1, rev2, rev3, rev4, rev5= st.columns(5)
  # Параметры реверберации
  with rev1:
    room_size = st.slider('Комната', min_value=0.0, max_value=1.0, step=0.1,
value=0.0)
  room_size1 = st.markdown("Комната – Реверберация небольшого помещения.
Подходит для применения к акустическим инструментам в камерной
атмосфере.")
  with rev2:
                = st.slider('демпинг', min_value=0.0, max_value=1.0, step=0.1,
    damping
value=0.0)
  with rev3:
    wet_level = st.slider('wet_level', min_value=0.0, max_value=1.0, step=0.1,
value=0.0)
  with rev4:
    dry_level = st.slider('dry_level', min_value=0.1, max_value=1.0, step=0.1,
value=0.1)
  with rev5:
    width = st.slider('длительность', min_value=0.0, max_value=1.0, step=0.1,
value=0.0)
  st.markdown("### Параметры фильтра")
  lf1, lf2, lf3 = st.columns(3)
  #Параметры фильтра
  with lf1:
    cutoff hz
                 = st.slider('uctota', min_value=0.0, max_value=1000.0, step=1.0,
value=0.0)
  with lf2:
    resonance_lad = st.slider('peзонанс', min_value=0.0, max_value=1.0, step=0.1,
value=0.0)
```

```
with lf3:
    drive lad
                   = st.slider('драйв', min_value=1.0, max_value=100.0, step=0.1,
value=1.0)
  #st.markdown("### Параметры фазы ")
  ch1,ps1 = st.columns(2)
  #Параметры фазы
  with ch1:
    st.markdown("### Параметры фазы")
    rate_hz_phaser = st.slider('рейтинг фазы', min_value=0.0, max_value=100.0,
step=0.1, value=0.0)
    depth_phaser = st.slider('глубина', min_value=0.0, max_value=1.0, step=0.1,
value=0.0)
  with ps1:
    st.markdown("### Параметры сдвига высоты тона")
                 = st.slider('semitones', min_value=0.0, max_value=12.0, step=1.0,
    semitones
value=0.0)
  if img2load is not None:
    # Сохранение
    img = Image.open(img2load)
    img = img.save("img.jpg")
    # Чтение файла OpenCv
    img = cv2.imread("img.jpg")
    img = cv2.cvtColor(img, cv2.COLOR_BGR2RGB)
    #Картинка на экране
    #st.image(img)
    #Создание шкалы звука
    scale_to_use = makeScale(octave, key, scale)
    #Создание песни
    song, song_df,harmony = img2music(img, scale = scale_to_use, T = t_value,
randomPixels
               =
                    random_pixels,
                                     useOctaves
                                                       use_octaves,
                                                                     nPixels
n_pixels,harmonize = harmony)
    #Записать звука в файл
    song_combined = np.vstack((song, harmony))
    wavfile.write('song.wav',
                                  rate
                                                      22050,
                                                                   data
                                             =
                                                                               =
song_combined.T.astype(np.float32))
    audio_file = open('song.wav', 'rb')
    audio_bytes = audio_file.read()
    # Чтение аудиофайла
    with AudioFile('song.wav', 'r') as f:
      audio = f.read(f.frames)
      samplerate = f.samplerate
    # Создание объекта Pedalboard с плагинами:
```

```
board = Pedalboard([
      Gain(gain_db=gain_db),
      Distortion(drive_db=drive_db),
      LadderFilter(mode=LadderFilter.Mode.HPF12,
cutoff_hz=cutoff_hz,resonance = resonance_lad,drive=drive_lad),
      Delay(delay_seconds = delay_seconds),
      Reverb(room_size = room_size, wet_level = wet_level, dry_level = dry_level,
width = width),
      Phaser(rate_hz = rate_hz_phaser, depth = depth_phaser),
      PitchShift(semitones = semitones),
      Chorus(rate_hz = rate_hz_chorus)
      1)
    # Пропуск звука через петалборд!
    effected = board(audio, samplerate)
    # Записать аудиофайл в формате -wav:
    with AudioFile('processed_song.wav', 'w', samplerate, effected.shape[0]) as f:
      f.write(effected)
    #Прочитать обработанную песню
    audio_file2 = open('processed_song.wav', 'rb')
    audio_bytes2 = audio_file2.read()
    #Воспроизвести песню
    st.audio(audio_bytes2, format='audio/wav')
    #@st.cache
    def convert_df_to_csv(df):
      # Необходимо кэшировать преобразование, чтобы избежать вычислений
при каждом запуске.
      return df.to_csv().encode('utf-8')
    #csv = song_df.to_csv('song.csv')
    st.download_button('Загузить
                                    музыку',
                                                data=convert_df_to_csv(song_df),
file_name="song.csv",mime='text/csv',key='download-csv')
  # Изображение не разгружено
  else:
    st.write("Ожидание загрузки изображения...")
  #st.markdown("# Main page ")
  #st.sidebar.markdown("# Main page ")
```

Заключение

В работе найден и построен путь преобразования цветового изображения в звуковое отображение. Это позволяет услышать, как звучит, например, портрет или какое-либо другое изображение. Для реализации такой возможности было выполнено преобразование цветового пространства объекта в пиксельную структуру, в которой каждому пикселю соответствовал свой цвет, яркость и насыщенность. Также было выполнено преобразование звукового поля в

соответствии со звучанием ноты, её тональности, её частотой. Построен словарь соответствия нот частотам и номерам клавиш на фортепиано. Далее для создания и обработки изображений выбрали цветовую модель HSV, был использован ряд библиотек, позволяющих визуализировать объект. На основе построенного цветового пространства построен код для считывания значений тона пикселя. Построен алгоритм преобразования цветового кода, определённого на пиксельной сетке изображения в звуковое отображение этого изображения.

Статья поступила в редакцию 01.11.2023 г.

ЛИТЕРАТУРА

- Color Calibration on Human Skin Images / Amani M., Falk H., Jensen O. D., Vartdal G., Aune A., Lindseth F. // 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. 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.
- 3. Чижов С. А. Управление цветом в широкоформатной печати: RGB VS CMYK // Science Time. 2018. № 9 (57). С. 43-47.

REFERENCES

- 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.
- Klyuchnikov S. A., Kalashnikov E. V. [Converting a pixel structure into sound imaginations. Part 1]. In: Vestnik Gosudarstvennogo universiteta prosveshcheniya. Seriya: Fizika-Matematika [Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics], 2023. no. 4, pp. 64–80.
- 3. Chizhov S. A. [Color management in large-format printing: RGB VS CMYK]. In: *Science Time*, 2018, no. 9 (57), pp. 43–47.

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 2 // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. № 1. С. 33–47. DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-33-47

FOR CITATION

Klyuchnikov S. A., Kalashnikov E. V. Converting a pixel structure into sound imaginations. Part 2. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2024, no. 1, pp. 33–47. DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-33-47

. 47 /

УДК 533.7 DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-48-55

ОЦЕНКА СТЕПЕНИ НЕРАВНОВЕСНОСТИ ГАЗА В Сверхзвуковых потоках

Красавин Е. Э.

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

Аннотация

Целью данной работы являлась оценка применимости моделей первого приближения для описания обтекания поверхностей большой кривизны (острых кромок).

Процедура и методы. В работе использованы методы молекулярно-кинетической теории газов. Для численного решения интегрально-дифференциальных уравнений применялось модельное кинетическое уравнение многоатомных газов.

Результаты. Рассчитана максимальная степень неравновесности газовой среды в задаче о профиле плоской ударной волны и в задаче обтекания тонкой пластины для двухатомного газа в интервале чисел Маха от 2-х до 8-ми. Получено почти двукратное превышение степени неравновесности в области носика пластины по сравнению с неравновесностью на профиле плоской ударной волны.

Теоретическая и практическая значимость. Полученные результаты подтверждают известное положение о физической неадекватности моделей первого приближения, в частности модели Навье – Стокса – Фурье (НСФ), при описании обтеканий острых кромок. Результаты могут быть использованы для разработки моделей течения, ориентированных на решение указанной задачи.

Ключевые слова: молекулярно-кинетическая теория газов, модельное кинетическое уравнение, динамическая неравновесность, острая кромка, ударная волна

Благодарности. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации, номер темы FSFF-2023-0008.

ASSESSMENT DEGREE OF DISEQUILIBRIUM GASE IN SUPERSONIC FLOWS

E. Krasavin

Moscow Aviation Institute (National Research University) ulitsa Volokolamskoe shosse 4, Moscow 125993, Russian Federation

Abstract

Aim. The purpose of this work was to assess the applicability of first approximation models for describing the flow around surfaces of high curvature (sharp edges).

48

[©] СС Красавин Е. Э., 2024.

Methodology.The work used methods of molecular kinetic theory of gases. To numerically solve integral-differential equations, a model kinetic equation of polyatomic gases was used.

Results. The maximum degree of gas disequilibrium medium was calculated in the problem on profile of flat shock wave and in the problem of flow around a thin plate for a diatomic gas in the range of Mach numbers from 2 to 8. An almost twofold increase in the degree of disequilibrium in the region of the plate nose was obtained compared with nonequilibrium on the profile of a plane shock wave.

Research implications. The results obtained confirm the well-known position about the physical inadequacy of first-approximation models, in particular the Navier – Stokes – Fourier (NSF) model, when describing flows around sharp edges. Results can be used to develop flow models aimed at solving this problem.

Keywords: molecular kinetic theory of gases, model kinetic equation, dynamic nonequilibrium, sharp edge, shock wave.

Acknowledgments. This work was financially supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation, project No. FSFF-2023-0008.

Введение

Актуальной задачей современной газовой динамики является разработка методов описания неравновесных течений. Решение современных задач производится в большом диапазоне чисел Маха и Кнудсена, поэтому количественная оценка степени неравновесности позволяет определить область применимости гидродинамических моделей.

Расчет газодинамических параметров в окрестности поверхности большой кривизны на сверхзвуковых режимах течения является актуальной задачей на сегодняшний день. Такую поверхность можно рассматривать как острую кромку с размером затупления пренебрежимо малым по сравнению с размером обтекаемого тела. В окрестности острой кромки возникает высоконеравновесное течение газа, что характерно при больших числах Маха. В таком случае происходит высоко градиентное изменение энергии как внутренних, так и поступательных степеней свободы молекул. По данной причине появляется немонотонность в распределении параметров газа в окрестности острой передней кромки [1].

В гиперзвуковой ударной волне возможен перехлёст функции распределения пар молекул в одноатомном газе, как показано в работе [2] на основе аналитических методов. Стоит отметить, что если рассмотреть обтекание пластины многоатомным газом, то учёт вращательного движения молекул приводит к уменьшению температуры в возмущённой области и нормального импульса на поверхности пластины [3]. Если рассматривать фронт ударной волны при обтекании газовой смесью, то важно учитывать компоненты с малой концентрацией, как показано в работе [4].

Возникновение ударной волны сопровождается значительным увеличением градиентов газодинамических параметров, что указывает на поступательную (динамическую) неравновесность [5]. Одной из особенностей обтекания острой кромки является появление сильно сжатой области по длине и ширине

пластины, когда ударная волна максимально приближается к носовой части летательного аппарата и локализуется в окрестности одной точки [6; 7].

Возмущённая область вблизи острой кромки порядка длины свободного пробега молекулы, поэтому наиболее важно проанализировать картину обтекания в окрестности острой кромки. Определение газодинамических параметров в этой области становится особенно затруднительным, если расчёт производится при больших числах Маха. В работе [8], например, приводятся расчётные данные для чисел Маха 23.

Если рассмотреть тела более сложной геометрии, например тонкий острый клин, то в окрестности носика наблюдается резкое изменение газодинамических параметров [9], сопровождающееся высоким разогревом поверхности. Также при решении ряда практических задач необходимо учитывать изменения формы кромки вследствие высокотемпературной эрозии.

Кинетические модели, описывающие течение на молекулярном уровне, имеют удвоенную по сравнению с гидродинамическими моделями размерность, что для практических задач сложно реализуемо. Применимость кинетических моделей в высоконеравновесной области также обусловлена очень мелкими сетками, что сопровождается значительным увеличением необходимых вычислительных ресурсов [10; 11].

Определение степени неравновесности течения

Под степенью неравновесности будем понимать определённую на единичном отрезке величину [12]:

$$W = \frac{\gamma - 1}{\sqrt{6 - 2\gamma}} \frac{\sqrt{p_{\alpha\beta} p_{\alpha\beta} + \frac{9}{4} (5 - 3\gamma) (\gamma - 1) (\rho R (T_t - T_r))^2}}{p}$$

В этом выражении повторяющиеся греческие индексы подразумевают нотацию Эйнштейна;

γ – показатель адиабаты;

*T*_t – поступательная температура молекул;

*T*_r – вращательная температура молекул;

р – плотность газа;

R – удельная газовая постоянная;

 $p = \rho RT$ – термодинамическое давление;

 $T = \frac{3}{2} (\gamma - 1) T_t + \frac{5 - 3\gamma}{2} T_r -$ термодинамическая температура;

 $p_{ij} = P_{ij} - p$ – неравновесное напряжение (компонент девиатора напряжений); P_{ij} – компонент тензора напряжений.

Определённая таким образом степень неравновесности имеет простой физический смысл, наиболее наглядный на примере одноатомного газа, в котором множитель 5-3у обращается в ноль. В этом случае дробь содержит два инварианта тензора напряжений: его свёртку и квадрат его девиатора.

50

Множитель перед дробью выбран так, чтобы в теоретическом пределе степень неравновесности равнялась единице.

Теоретический предел неравновесного состояния имеет место в том случае, если вся энергия теплового движения молекул сосредоточена на одной поступательной степени свободы.

Серийные расчёты

Расчёты проводились на базе модельного кинетического уравнения многоатомных газов [13]. Задача о профиле плоской ударной волны решалась с использованием программного пакета [14]

Обтекание тонкой пластины, установленной под нулевым углом атаки, рассчитывалась программным пакетом [15].

Рассматривались течения двухатомного газа в интервале чисел Маха $M_{\infty}=2...8$. Параметр поступательно-вращательной релаксации принимался постоянным и составлял Z=5. При решении задачи обтекания пластины температура поверхности принималась равной 0.1 от температуры торможения потока.

Расчёты показали, что в плоской ударной волне максимальное значение степени неравновесности достигается примерно на середине профиля скорости. В задаче обтекания тонкой пластины максимум неравновесности наблюдается на носике пластины.

Ниже приводится график зависимости максимального значения степени неравновесности от числа Маха. Сплошная линия соответствует задаче об обтекании пластины, пунктирная – плоской ударной волне.



Рис. 1 / Fig. 1. Зависимость максимального значения степени неравновесности от числа Маха. Сплошная линия соответствует задаче об обтекании пластины [15], пунктирная – плоской ударной волне [14] / Dependence of the maximum value of the degree of nonequilibrium on the Mach number. The solid line corresponds to the problem of flow past a plate [15], the dotted line corresponds to a plane shock wave [14] Источник: составлено автором.

Обсуждение результатов. Заключение

Проведённые расчёты показывают, что течение в области носика тонкой пластины (острой кромки) существенно более неравновесно, чем в плоской ударной волне. Максимальные степени неравновесности отличаются примерно вдвое.

Из теории скачков уплотнения, используемой в механике сплошной среды, известно, что прямой скачок (плоская ударная волна) более интенсивен, чем косые скачки. При обтекании тонкой пластины возникает косой скачок. При гиперзвуковых числах Маха скачок почти прижат к обтекаемой поверхности.

С точки зрения молекулярно-кинетической теории газов ударная волна (скачок уплотнения) представляет собой высокоградиентную и, следовательно, высоко неравновесную область. При обтекании острой кромки на неравновесность течения оказывает влияние не только большие скорости потока, но и малые размеры обтекаемого объекта, т.. острой кромки.

Модели первого приближения, например модель НСФ, теоретически обоснованы только в области слабо неравновесных течений. При расчёте профилей ударных волн модель НСФ даёт слишком малые возмущённые области. В ряде работ, в том числе приведённых во Введении, показано, что модель НСФ может давать даже качественно неверные результаты при описании обтекания поверхностей большой кривизны, интерпретируемых как острые кромки.

Результаты настоящей работы позволяют провести количественную оценку применимости моделей первого приближения.

Статья поступила в редакцию 21.11.2023 г.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Кузнецов М. М., Липатов И. И., Никольский В. С. Асимптотический анализ эффектов поступательной неравновесности в гиперзвуковом течении около плоской поверхности с острой передней кромкой // Письма в Журнал технической физики. 2008. Т. 34. № 8. С. 21–28.
- 2. О максимуме эффекта высокоскоростной поступательной неравновесности в ударной волне / Кузнецов М. М., Кулешова Ю. Д., Смотрова Л. В, Решетникова Ю. Г. // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2016. № 3. С. 84–95. DOI: 10.18384/2310-7251-2016-3-84-95.
- 3. Горелов С. Л., Ерофеев А. И. Расчет обтекания пластины потоком разреженного газа с учетом вращательных степеней свободы молекул // Ученые записки ЦАГИ. 1979. Т. 10. № 2. С. 59–64.
- 4. Распределение молекулярных скоростей во фронте ударной волны в газовых смесях / Генич А. П., Куликов С. В., Манелис Г. Б., Черешнев С. Л. // Известия Академии наук СССР. Механика жидкости и газа. 1990. № 2. С. 144–150.
- 5. Куликов С. В., Терновая О. Н., Черешнев С. Л. Специфика поступательной неравновесности во фронте ударной волны в однокомпонентном газе // Химическая физика. 1993. Т. 12. № 3. С. 340–342.

- 6. Шершнев А. А., Кудрявцев А. Н., Бондарь Е. А. Численное моделированием сверхзвукового течения газа около плоской пластины на основе кинетических и континуальных моделей // Вычислительные технологии. 2011. Т. 16. № 6. С. 93–104.
- 7. Ерофеев А. И., Перепухов В. А. Расчет обтекания пластины бесконечного размаха потоком разреженного газа // Ученые записки ЦАГИ. 1976. Т. 7. № 1. С. 102–106.
- 8. Егоров И. В., Ерофеев А. И. Сопоставление моделирования гиперзвукового обтекания плоской пластины на основе метода Монте-Карло и уравнений Навье Стокса // Известия Российской Академии наук. Механика жидкости и газа. 1997. № 1. С. 135–144.
- 9. Кузнецов А. А., Лунев В. В. Нагрев тонкого острого клина в сверхзвуковом потоке // Известия Российской Академии наук. Механика жидкости и газа. 2021. № 1. С. 115–119. DOI: 10.31857/S0568528121010072.
- 10. Березко М. Э., Никитченко Ю. А. Численное решение задачи гиперзвукового обтекания тонкой пластины // Известия Российской Академии наук. Механика жидкости и газа. 2022. № 2. С. 87–95. DOI: 10.31857/S0568528122020025.
- 11. Aoki K., Kanba K., Takata Sh. Numerical analysis of a supersonic rarefied gas flow past a flat plate // Physics of Fluids. 1997. Vol. 9. Iss. 4. P. 1144–1161. DOI: 10.1063/1.869204.
- 12. Никитченко Ю. А. Модели неравновесных течений. М.: Изд-во МАИ, 2013. 160 с.
- 13. Никитченко Ю. А. Модельное кинетическое уравнение многоатомных газов // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2017. Т. 57. № 11. С. 1882–1894. DOI: 10.7868/S0044466917110114.
- 14. Никитченко Ю. А., Красавин Е. Э., Зинина А. И. Программа расчета ударной волны с вычислением моментов высокого порядка с использованием модельного кинетического уравнения многоатомных газов. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023683877, 2023 г.
- 15. Никитченко Ю. А., Березко М. Э. Программа расчета гиперзвукового обтекания тонкой пластины, установленной параллельно потоку. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022612341, 2022 г.

REFERENCES

- Kuznetsov M. M., Lipatov I. I., Nikol'skiy V. S. [Asymptotic analysis of the translational nonequilibrium effects in a hypersonic flow past a flat surface with sharp leading edge]. In: *Pisma v Zhurnal tekhnicheskoy fiziki* [Technical Physics Letters], 2008, vol. 34, no. 8, pp. 21–28.
- Kuznetsov M. M., Kuleshova Yu. D., Smotrova L. V, Reshetnikova Yu. G. [On the maximum effect of high translational nonequilibrium in the shock wave]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta*. *Seriya: Fizika-matematika* [Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics], 2016, no. 3, pp. 84– 95. DOI: 10.18384/2310-7251-2016-3-84-95.
- Gorelov S. L., Yerofeyev A. I. [Calculation of a rarefied gas flow around a plate taking into account the rotational degrees of freedom of molecules]. In: *Uchenyye zapiski TSAGI* [Scientific notes of Central Aerohydrodynamic Institute], 1979, vol. 10, no. 2, pp. 59–64.
- 4. Genich A. P., Kulikov S. V., Manelis G. B., Chereshnev S. L. [Distribution of molecular velocities in the front of a shock wave in gas mixtures]. In: *Izvestiya Akademii nauk SSSR. Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid Dynamics], 1990, no. 2, pp. 144–150.
- 5. Kulikov S. V., Ternovaya O. N., Chereshnev S. L. [Specificity of Translational Nonequilibrium in the Shock Wave Front Propagating through a Single-Component Gas].

In: *Khimicheskaya fizika* [Soviet Journal of Chemical Physics], 1993, vol. 12, no. 3, pp. 340–342.

- 6. Shershnev A. A., Kudryavtsev A. N., Bondar' Ye. A. [Numerical Simulation of a Supersonic Gas Flow past a Flat Plate Based on Kinetic and Continuum Models]. In: *Vychislitel'nyye tekhnologii* [Computational Technologies], 2011, vol. 16, no. 6, pp. 93–104.
- Yerofeyev A. I., Perepukhov V. A. [Calculation of a rarefied gas flow around a plate of infinite span]. In: *Uchenyye zapiski TSAGI* [Scientific notes of Central Aerohydrodynamic Institute], 1976, vol. 7, no. 1, pp. 102–106
- 8. Yegorov I. V., Yerofeyev A. I. [Comparison of modeling of hypersonic flow around a flat plate based on the Monte Carlo method and the Navier–Stokes equations]. In: *Izvestiya Rossiyskoy Akademii nauk. Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid Dynamics], 1997, vol. 1, pp. 135–144.
- 9. Kuznetsov A. A., Lunev V. V. [Heating of a sharp slender wedge in supersonic flow]. In: *Izvestiya Rossiyskoy Akademii nauk. Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid Dynamics], 2021, no. 1, pp. 115–119. DOI: 10.31857/S0568528121010072.
- Berezko M. E., Nikitchenko Yu. A. [Numerical solution of the problem of hypersonic flow around a thin plate]. In: *Izvestiya Rossiyskoy Akademii nauk. Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid Dynamics], 2022, no. 2, pp. 87–95. DOI: 10.31857/S0568528122020025.
- 11. Aoki K., Kanba K., Takata Sh. Numerical analysis of a supersonic rarefied gas flow past a flat plate. In: *Physics of Fluids*, 1997, vol. 9, iss. 4, pp. 1144–11611. DOI: 10.1063/1.869204.
- 12. Nikitchenko Yu. A. *Modeli neravnovesnykh techeniy* [Models of nonequilibrium flows]. Moscow, Moscow Aviation Institute Publ., 2013. 160 p.
- Nikitchenko Yu. A. [Model kinetic equation of polyatomic gases]. In: *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki* [Computational Mathematics and Mathematical Physics], 2017, vol. 57, no. 11, pp. 1882–1894. DOI: 10.7868/S0044466917110114.
- 14. Nikitchenko Yu. A., Krasavin Ye. E., Zinina A. I. Programma rascheta udarnoy volny s vychisleniyem momentov vysokogo poryadka s ispol'zovaniyem model'nogo kineticheskogo uravneniya mnogoatomnykh gazov. Svidetel'stvo o gosudarstvennoy registratsii programmy dlya EVM № 2023683877 [Program for calculating a shock wave with the calculation of high-order moments using the model kinetic equation of polyatomic gases. Certificate of state registration of a computer program No. 2023683877], 2023.
- 15. Nikitchenko Yu. A., Berezko M. E. Programma rascheta giperzvukovogo obtekaniya tonkoy plastiny, ustanovlennoy parallel'no potoku. Svidetel'stvo o gosudarstvennoy registratsii programmy dlya EVM № 2022612341 [Program for calculating hypersonic flow around a thin plate installed parallel to the flow. Certificate of state registration of a computer program No. 2022612341], 2022.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ

Красавин Егор Эдуардович – аспирант кафедры «Аэродинамика, динамика и управление летательных аппаратов» Московского авиационного института (национального исследовательского университета); e-mail: krasavin.ieghor@mail.ru

INFORMATION ABOUT AUTHOR

Egor E. Krasavin – Postgraduate Student, Department of Aerodynamics, dynamics and control of aircraft, Moscow Aviation Institute (National Research University) e-mail: krasavin.ieghor@mail.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Красавин Е. Э. Оценка степени неравновесности газа в сверхзвуковых потоках // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. № 1. С. 48–55.

DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-48-55.

FOR CITATION

Krasavin E. E. Assessment degree of disequilibrium gase in supersonic flows. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2024, no. 1, pp. 48–55. DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-48-55

УДК 533.27; 519.6 DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-56-67

МОДЕЛЬНОЕ КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ СМЕСИ ОДНО- И МНОГОАТОМНЫХ ГАЗОВ

Никитченко Ю. А., Сергеева Н. И.

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

Аннотация

Целью данной работы являлось построение физико-математической модели течений смесей многоатомных газов в виде модельного кинетического уравнения.

Процедура и методы. В работе использованы методы молекулярно-кинетической теории газов, ориентированные на нахождение поступательных и вращательных энергий компонентов смеси газа. Для реализации разработанной модели применялись методики численного решения интегрально-дифференциальных уравнений.

Результаты. Проведено тестирование модели на примере ударной волны для смеси азота и кислорода. Показано удовлетворительное соответствие с результатами других авторов, полученных методами прямого статистического моделирования.

Теоретическая и практическая значимость. Разработанная модель позволяет описывать высоконеравновесные процессы в смесях газов. К таким процессам, в частности, относится взаимодействие газа с активными поверхностями.

Ключевые слова: молекулярно-кинетическая теория газов, модельное кинетическое уравнение, многоатомные газы, динамическая неравновесность, смеси газов, ударная волна

Благодарности. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства Образования и Науки Российской Федерации, номер темы FSFF-2023-0008.

MODEL KINETIC EQUATION OF MONO- AND POLYATOMIC GAS MIXTURE

Yu. Nikitchenko, N. Sergeeva

Moscow Aviation Institute (National Research University) ulitsa Volokolamskoye shosse 4, Moscow 125993, Russian Federation

Abstract

The aim of this work was to build a physical and mathematical model of the flows of mixtures of polyatomic gases in the form of a model kinetic equation.

Methodology. The paper uses methods of the molecular kinetic theory of gases, focused on finding the translational and rotational energies of the components of a gas mixture. To

[©] СС Никитченко Ю. А., Сергеева Н. И., 2024.

implement the developed model, methods of numerical solution of integral differential equations were used.

Results. The model was tested on the example of a shock wave problem for a mixture of nitrogen and oxygen. A satisfactory agreement with the results of other authors obtained by direct statistical modeling methods is shown.

Research implications. The developed model makes it possible to describe highly nonequilibrium processes in gas mixtures. Such processes include, in particular, the interaction of gas with active surfaces.

Keywords: molecular kinetic theory of gases, model kinetic equation, polyatomic gas, gas mixtures, dynamic disequilibrium, shock wave

Acknowledgments. This study was carried out as part of a state assignment of the Russian Ministry of Education and Science, topic no. FSFF-2023-0008.

Введение

В настоящее время актуальной проблемой механики жидкости и газа является разработка моделей неравновесных течений смесей газов. Одним из приложений таких моделей является, например, задача разделения компонентов смеси при их взаимодействии с активными поверхностями. Активность поверхности подразумевает процессы конденсации, хемосорбции и т. п.

Существует множество методов расчёта неравновесных течений смесей газов, как аналитических [1; 2; 3; 4; 5; 6], так и численных. Один из наиболее широко используемых численных методов – метод прямого статистического моделирования [7; 8; 9]. Однако применение данных методов для практических задач требует значительных вычислительных ресурсов и используется только для расчёта течений разреженных газов.

Также имеется множество работ, связанных с построением модельных кинетических уравнений, использующих интеграл обратных столкновений в упрощённом виде [10; 11; 12; 13; 14].

Имеющиеся экспериментальные работы по исследованию параметров компонентов смесей в основном относятся к течениям одноатомных газов. В частности, имеется множество статей по экспериментальным исследованиям структуры ударных волн в смесях аргона и гелия [15; 16; 17].

Моделирование течений многоатомных газов представляет определённые сложности, связанные с физически адекватным описанием энергообмена между поступательными и вращательными степенями свободы молекулы в условиях межкомпонентного взаимодействия. С большей или меньшей степенью физической адекватности такие процессы рассмотрены в работах [14; 19; 20; 21].

Целью данной работы являлось построение модельного кинетического уравнения (МКУ), описывающего течения смесей многоатомных газов. МКУ строилось на основе работы [21]. Модель для смеси одноатомных газов представлена в работе [22].

Энергообмен в межмолекулярных и межкомпонентных взаимодействиях

Рассматриваются только парные соударения молекул, химические реакции не учитываются.

Ниже параметры рассматриваемого компонента (плотность, скорость, температура, коэффициент вязкости т. п.) будем обозначать верхним индексом К, а фонового компонента – верхним N. Это же правило будет использоваться и для параметров межмолекулярных взаимодействий (относительная скорость, частота столкновений и т. п.), содержащих два индекса.

При рассмотрении многоатомных молекул возникает необходимость разделения поступательной и вращательной температур газа.

В случае столкновения молекул одного компонента (*КК*-столкновение) термодинамическая температура определяется выражением

$$T^{K} = \frac{3}{2} (\gamma^{K} - 1) T_{t}^{K} + \frac{5 - 3\gamma^{K}}{2} T_{r}^{K},$$

где γ^{K} -показатель адиабаты данного компонента, T_{t}^{K} и T_{r}^{K} – поступательная и вращательная температуры.

По аналогии с работой [21] температура молекул, испытавших одно столкновение, может быть представлена следующим образом:

$$T_t^{+K} = T^K + \frac{5 - 3\gamma^K}{2} \frac{Z^K - 1}{Z^K} (T_t^K - T_r^K)$$
(1)

$$T_r^{+K} = T^K - \frac{3}{2} (\gamma^K - 1) \frac{Z^{K-1}}{Z^K} (T_t^K - T_r^K)$$
(2)

В данных выражениях Z – параметр столкновений. Данный параметр показывает, сколько столкновений в среднем приходится на одно неупругое столкновение.

Рассмотрим столкновения молекул разных компонентов – межкомпонентные столкновения или *KN*-столкновения. В работе [22] показано, что в рамках приближения МКУ групповая скорость молекул, испытавших одно межкомпонентное столкновение \mathbf{U}^{KN} , может быть определена на основе закона сохранения импульса без учёта неполной релаксации групповых скоростей компонентов \mathbf{U}^{KN} и \mathbf{U}^{KN} , имевших место до столкновения:

$$\mathbf{U}^{KN} = \frac{m^K}{m^K + m^N} \mathbf{U}^K + \frac{m^N}{m^K + m^N} \mathbf{U}^N$$
(3)

С учётом этого допущения закон сохранения энергии взаимодействующих компонентов принимает вид:

$$c_{v}^{KN}2n^{KN}m^{KN}T^{KN} + 2n^{KN}m^{KN}\frac{(\mathbf{U}^{KN})^{2}}{2} = c_{v}^{K}n^{KN}m^{K}T^{K} +$$
(4)
$$n^{KN}m^{K}\frac{(\mathbf{U}^{K})^{2}}{2} + c_{v}^{N}n^{KN}m^{N}T^{N} + n^{KN}m^{N}\frac{(\mathbf{U}^{N})^{2}}{2}$$

Здесь T^{KN} – термодинамическая температура обоих компонентов после *KN*-столкновения, c_v^{KN} , c_v^K и c_v^N – изохорные теплоёмкости, n^{KN} -концентрация молекул каждого компонента, участвующего в *KN*-столкновениях, m^K и m^N – молекулярные массы рассматриваемого и фонового компонентов соответственно.

ISSN 2949-5083

Из (3) и (4) следует

$$T^{KN} = \frac{1}{1 + \frac{\gamma^{K-1}}{\gamma^{N} - 1}} T^{K} + \frac{1}{1 + \frac{\gamma^{N} - 1}{\gamma^{K} - 1}} T^{N} + \frac{1}{2k} \frac{\gamma^{K} - 1}{1 + \frac{\gamma^{K} - 1}{\gamma^{N} - 1}} \frac{m^{K} m^{N}}{m^{K} + m^{N}} (\mathbf{U}^{K} - \mathbf{U}^{N})^{2}, \qquad (5)$$

где *k* – постоянная Больцмана.

Для определения поступательной и вращательной температур молекул, участвующих в KN-столкновениях, примем следующее допущение: после межкомпонентных столкновений поступательные температуры обоих компонентов равны T_t^+ , вращательные температуры компонентов различны и определены как

$$(T_r^+)_N^K = T_r^K + \frac{1}{Z^K} (T^{KN} - T_r^K) = \frac{1}{Z^K} T^{KN} + \frac{Z^{K-1}}{Z_N^K} T_r^K$$
(6)

$$(T_r^+)_K^N = T_r^N + \frac{1}{Z^N} (T^{KN} - T_r^N) = \frac{1}{Z^N} T^{KN} + \frac{Z^N - 1}{Z^N} T_r^N$$
(7)

Эти температуры имеют тот же физический смысл, что и температуры, определённые зависимостями (1) и (2). Баланс энергии теплового движения молекул, заключённых в единице объёма, может быть записан следующим образом:

$$kn^{KN}T^{KN} = 3kn^{KN}T_t^+ + kn^{KN}\frac{5-3\gamma^K}{2(\gamma^K-1)}(T_r^+)_N^K + kn^{KN}\frac{5-3\gamma^N}{2(\gamma^N-1)}(T_r^+)_K^N$$

Общая для компонентов температура T_t^+ определена выражением

$$T_t^+ = \frac{1}{3} \left\{ \left[\left(1 - \frac{5 - 3\gamma^K}{2} \frac{1}{Z^K} \right) \frac{1}{\gamma^K - 1} + \left(1 - \frac{5 - 3\gamma^N}{2} \frac{1}{Z^N} \right) \frac{1}{\gamma^N - 1} \right] T^{KN} - \frac{5 - 3\gamma^K}{2(\gamma^K - 1)} \frac{Z^K - 1}{Z^K} T_r^K - \frac{5 - 3\gamma^N}{2(\gamma^N - 1)} \frac{Z^N - 1}{Z^N} T_r^N \right\}$$

Тестирование модели

МКУ для смеси газов имеет вид [22]:

$$\frac{\partial f^{K}}{\partial t} + \xi_{\alpha} \frac{\partial f^{K}}{\partial x_{\alpha}} = \nu^{KK} (f_{K}^{+K} - f^{K}) + \sum_{N \neq K} \nu_{N}^{K} (f_{N}^{+K} - f^{K})$$

Здесь $f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, \varepsilon)$ – функция распределения молекул по скоростям, $\boldsymbol{\xi}$ – молекулярная скорость, ε – энергия вращения молекулы, v^{KK} и v^{KN} –частоты столкновений.

Чтобы оценить физическую адекватность разрабатываемого МКУ, была решена задача о профиле ударной волны. Задача решалась для двухкомпонентного газа.

Если газ движется вдоль одной из координатных осей, обозначаемой далее как x, то можно сократить количество измерений функции распределения, введя в рассмотрение три функции f_n , f_p и f_ω для каждого из компонентов:

$$f_n(t, x, \xi_x) = \int f d\xi_y d\xi_z d\varepsilon$$
$$f_p(t, x, \xi_x) = \int (c_y^2 + c_z^2) f dc_y dc_z d\varepsilon$$
$$f_\omega(t, x, \xi_x) = \int \varepsilon f d\xi_y d\xi_z d\varepsilon$$

Здесь и далее $c_i = \xi_i - U_i$ – проекция вектора тепловой скорости молекул. В одномерной задаче очевидно: $c_y = \xi_y$, $c_z = \xi_z$.

Кинетические уравнения принимают вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{vmatrix} f_n^K \\ f_p^K \\ f_\omega^K \end{vmatrix} + \xi_x \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \begin{vmatrix} f_n^K \\ f_p^K \\ f_\omega^K \end{vmatrix} = \nu^{KK} \begin{vmatrix} f_n^K - f_n^K \\ f_p^F - f_p^K \\ f_\omega^K - f_\omega^K \end{vmatrix} + \nu_N^K \begin{vmatrix} f_{nN}^{+K} - f_n^K \\ f_{nN}^{+K} - f_p^K \\ f_{\omega N}^{+K} - f_\omega^K \end{vmatrix}$$

Здесь

$$\begin{split} f_{nK}^{+K} &= \frac{n^{K}}{\sqrt{2\pi R^{K} T_{t}^{+K}}} exp\left(-\frac{(c^{K})_{x}^{2}}{2R^{K} T_{t}^{+K}}\right) \left(1 + \frac{(q^{K})_{x} (c^{K})_{x}}{15 \rho^{K} (R^{K} T_{t}^{+K})^{2}} \left(\frac{(c^{K})_{x}^{2}}{R^{K} T_{t}^{+K}} - 3\right)\right) \right) \\ f_{pK}^{+K} &= \frac{2R^{K} T_{t}^{+K} n^{K}}{\sqrt{2\pi R^{K} T_{t}^{+K}}} exp\left(-\frac{(c^{K})_{x}^{2}}{2R^{K} T_{t}^{+K}}\right) \left(1 + \frac{(q^{K})_{x} (c^{K})_{x}}{15 \rho^{K} (R^{K} T_{t}^{+K})^{2}} \left(\frac{(c^{K})_{x}^{2}}{R^{K} T_{t}^{+K}} - 1\right)\right) \right) \\ f_{nN}^{+K} &= \frac{n^{K}}{\sqrt{2\pi R^{K} T_{t}^{+}}} exp\left(-\frac{(c_{N}^{+K})_{x}^{2}}{2R^{K} T_{t}^{+}}\right) \left(1 + \frac{(q^{K})_{x} (c_{N}^{+K})_{x}}{15 \rho^{K} (R^{K} T_{t}^{+})^{2}} \left(\frac{(c_{N}^{+K})_{x}^{2}}{R^{K} T_{t}^{+}} - 3\right)\right) \\ f_{pN}^{+K} &= \frac{2R^{K} T_{t}^{+} n^{K}}{\sqrt{2\pi R^{K} T_{t}^{+}}} exp\left(-\frac{(c_{N}^{+K})_{x}^{2}}{2R^{K} T_{t}^{+}}\right) \left(1 + \frac{(q^{K})_{x} (c_{N}^{+K})_{x}}{15 \rho^{K} (R^{K} T_{t}^{+})^{2}} \left(\frac{(c_{N}^{+K})_{x}^{2}}{R^{K} T_{t}^{+}} - 1\right)\right) \\ f_{\omega K}^{+K} &= \frac{5 - 3\gamma^{K}}{2(\gamma^{K} - 1)} kT_{r}^{+K} f_{nK}^{+K}, \quad f_{\omega N}^{+K} &= \frac{5 - 3\gamma^{N}}{2(\gamma^{N} - 1)} k(T_{r}^{+})_{x}^{K} f_{nN}^{+K} \\ (c_{N}^{+K})_{x} &= \xi_{x} - (U^{KN})_{x}, \quad \mathbf{R}^{K} = \mathbf{k}/\mathbf{m}^{K} \end{split}$$

Моменты функции распределения:

$$n^{K} = \int f_{n}^{K} d\xi_{x}$$

$$(U^{K})_{x} = \frac{1}{n^{K}} \int \xi_{x} f_{n}^{K} d\xi_{x}$$

$$T_{t}^{K} = \frac{1}{3R^{K}n^{K}} \int ((c^{K})_{x}^{2} f_{n}^{K} + f_{p}^{K}) dc_{x}$$

$$T_{r}^{K} = \frac{2(\gamma^{K} - 1)}{(5 - 3\gamma^{N})n^{K}} \int f_{\omega}^{K} dc_{x}$$

$$(q^{K})_{x} = \frac{n^{K}}{2} \int ((c^{K})_{x}^{3} f_{n}^{K} + (c^{K})_{x} f_{p}^{K}) c_{x}$$

Решение кинетического уравнения строилось как первая начально-краевая задача. На границах вычислительной области задавались условия невозмущённого потока и условия Ренкина-Гюгонио. Учитывалось, что групповые скорости и температуры на границах, находящихся в условиях равновесия, одинаковы для обоих компонентов. Скорость звука и, следовательно, число Маха в невозмущённом потоке, определялись по кажущейся массе молекул.

Для численного решения задачи использовался метод установления с шагом по времени Δt . Геометрическая сетка имела постоянный шаг Δx . Сетка в скоростном пространстве имела постоянный шаг $\Delta \xi$. Конечно-разностный

_60 _

шаблон, по аналогии с [21; 22], формировался на четырёх узлах расчётной сетки со смещением против потока (молекулярного потока). В результате для $\xi_x \ge 0$ и $\xi_x \le 0$ были получены четырёхдиагональные матрицы.

Полученные результаты

Ниже на рис. 1 и рис. 2 приведены профили поступательой и вращательной температур, построенные для смеси азота и кислорода при $M_{\infty} = 3$ и $M_{\infty} = 5$. Свободный параметр модели, определяющий зависимость коэффициента вязкости от температуры, принимался s = 0.5. Параметр столкновений принимался как $Z^{\kappa} = Z^{N}=5$. Для сравнения использованы расчётные данные работы [14], где данные были получены методом прямого статистического моделирования.

Рассчитанные профили приведены к единичному отрезку:

$$\rho^* = \frac{\rho - \rho_1}{\rho_2 - \rho_1} \\ T^* = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1}$$

Значение координаты $\frac{x}{\lambda_{\infty}} = 0$ соответствует середине профиля суммарной плотности.

Полученные зависимости показывают, что наблюдается удовлетворительная сходимость.



Рис. 1 / **Fig. 1**. Профили поступательной и вращательной температур смеси азота и кислорода в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание азота 80%,

 $M_{\infty} = 3$, s = 0.5. Точки – данные работы [14], крестики – азот, кружки – кислород.

Пунктир – азот, сплошная линия – кислород / Profiles of translational and rotational temperatures of a mixture of nitrogen and oxygen in a plane shock wave of a two-component gas, nitrogen content 80%, M∞ = 3, s = 0.5. Dots – data from [14], crosses – nitrogen, circles – oxygen. Dashed line – nitrogen, solid line – oxygen.

Источник: составлено авторами.



Рис. 2 / Fig. 2. Профили поступательной и вращательной температур смеси азота и кислорода в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание азота 80%,

 $M_{\infty} = 5, s = 0.5$. Точки – данные работы [14], крестики – азот, кружки – кислород. Пунктир – азот, сплошная линия – кислород / Profiles of translational and rotational temperatures of a mixture of nitrogen and oxygen in a plane shock wave of a two-component gas, nitrogen content 80%, $M_{\infty} = 5, s = 0.5$. Dots – data from [14], crosses – nitrogen, circles – oxygen. Dashed line – nitrogen, solid line – oxygen

Источник: составлено авторами.



Рис. 3 / **Fig. 3.** Профили плотности смеси водорода и углекислого в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание водорода 50%, $M_{\infty} = 3$, s = 0.5. Пунктир – водород, сплошная линия – углекислый газ / Density profiles of a mixture of hydrogen and carbon dioxide in a plane shock wave of a two-component gas, hydrogen content 50%, $M_{\infty} = 3$, s = 0.5. Dashed line – hydrogen, solid line – carbon dioxide

Источник: составлено авторами.



Рис. 4 / Fig. 4. Профили поступательной и вращательной температур смеси водорода и углекислого в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание водорода 50%, $M_{\infty} = 3$, s = 0.5. Пунктир – водород, сплошная линия – углекислый газ / Profiles of translational and rotational temperatures of a mixture of hydrogen and carbon dioxide in a plane shock wave of a two-component gas, hydrogen content 50%, $M_{\infty} = 3$, s = 0.5. Dashed line – hydrogen, solid line – carbon dioxide

Источник: составлено авторами.

Так как массы молекул азота и кислорода различаются незначительно, то на рис. 1 и 2 наблюдается незначительное расхождение профилей поступательных и вращательных температур компонент.

На рис. 3 и рис. 4 показаны результаты расчёта с применением полученной модели для смеси водорода и углекислого газа для числа Маха $M_{\infty} = 3$ с содержанием компонент в смеси в равных пропорциях.

Заключение

В настоящей работе приведено модельное кинетическое уравнение для смеси многоатомных газов. Проведённые численные тесты показывают, что разработанная модель даёт удовлетворительную сходимость с результатами расчётов с применением метода Монте-Карло.

Разработанная модель позволяет получить индивидуальные для каждого компонента системы моментных уравнений.

Статья поступила в редакцию 18.12.2023 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Analytical theory of high-speed nonequilibrium in a binary mixture of gases with a predominant light component / Demidov I. V., Kuznetsov M. M., Kuleshova Y. D.,

Tikhonovets A. V. // Journal of Physics: Conference Series. 2021. Vol. 2056, International Conference "Advanced Element Base of Micro- and Nano-Electronics with Using of ToDate Achievements of Theoretical Physics" (MRSU, 20-23 April 2021, Moscow, Russia). Article number 012008. DOI: 10.1088/1742-6596/2056/1/012008.

- 2. Условия возникновения и величина эффекта высокоскоростного перехлёста в ударно-сжатой смеси газов / Кузнецов М. М., Кулешова Ю. Д., Решетникова Ю. Г., Смотрова Л. В. // Труды МАИ (сетевое научное издание). 2017. № 95. URL: https://mai.ru/upload/iblock/96c/Kuznetsov_Kuleshova_Reshetnikova_Smotrova_rus.pdf (дата обращения: 10.10.2023).
- 3. Распределение молекулярных скоростей во фронте ударной волны в газовых смесях / Генич А. П., Куликов С. В., Манелис Г. Б., Черешнев С. Л. // Известия Академии наук СССР. Механика жидкости и газа. 1990. № 2. С. 144–150.
- 4. Куликов С. В., Терновая О. Н., Черешнев С. Л. Специфика поступательной неравновесности во фронте ударной волны в однокомпонентном газе // Химическая физика. 1993. Т. 12. № 3. С. 340–342.
- 5. Высокоскоростная поступательная неравновесность смеси газов в аналитической волны / Кузнецов М. М., модели ударной Матвеев С. В., Молоствин Е. В., Решетникова Ю. Г., Смотрова Л. В // Физико-химическая кинетика В газовой динамике (электронное издание). 2016. T. 17. № 1. URL: http://chemphys.edu.ru/issues/2016-17-1/articles/613/ (дата обращения: 10.10.2023).
- 6. О максимуме эффекта высокоскоростной поступательной неравновесности в ударной волне / Кузнецов М. М., Кулешова Ю. Д., Смотрова Л. В., Решетникова Ю. Г. // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2016. № 3. С. 84–95. DOI: 10.18384/2310-7251-2016-3-84-95.
- 7. Куликов С. В. Поступательная неравновесность трехкомпонентного газа во фронте ударной волны// Известия Российской Академии наук. Механика жидкости и газа. 1997. № 4. С. 171–178.
- Raines A. A. Study of a shock wave structure in gas mixtures on the basis of the Boltzmann equation // European Journal of Mechanics – B/Fluids. 2002. Vol. 21. Iss. 5. P. 599–610. DOI: 10.1016/S0997-7546(02)01197-4.
- Sabouri M., Darbandi M. Numerical study of species separation in rarefied gas mixture flow through micronozzles using DSMC // Physics of Fluids. 2019. Vol. 31. Iss. 4. P. 042004. DOI: 10.1063/1.5083807.
- Oguchi H. A kinetic model for a binary mixture and its application to a shock structure // Rarefied Gas Dynamics. Vol. 1 / ed. C. L. Brundin. New York – London: Academic Press, 1967. P. 745–758.
- Abe K., Oguchi H. Shock wave structure in binary gas mixture // Rarefied Gas Dynamics. Vol. 6 / eds. L. Trilling and H. Y. Wachman. New York – London: Academic Press, 1969. P. 425–429.
- Todorova B. N., Steijl R. Derivation and numerical comparison of Shakhov and ellipsoidal statistical kinetic models for a monoatomic gas mixture // European Journal of Mechanics – B/Fluids. 2019. Vol. 76. P. 390–402 DOI: 10.1016/j.euromechflu.2019.04.001.
- 13. Lorenzani S. A microchannel flow application of a linearized kinetic Bhatnagar-Gross-Krook-type model for inert gas mixtures with general intermolecular forces // Physics of Fluids. 2019. Vol. 31. Iss. 7. P. 072001. DOI: 10.1063/1.5098013.

- Todorova B. N., White C., Steijl R. Modeling of nitrogen and oxygen gas mixture with a novel diatomic kinetic model // AIP Advances. 2020. Vol. 10. Iss. 9. P. 095218. DOI: 10.1063/5.0021672.
- Harnett L. M., Muntz E. P. Experimental investigation of normal shock wave velocity distribution functions in mixtures of Argon and Helium // Physics of Fluids. 1972. Vol. 15. Iss. 4. P. 565–572. DOI: 10.1063/1.1693949.
- 16. Center R. E. Measurements of shock-wave structure in helium-argon mixtures // Physics of Fluids. 1967. Vol. 10. Iss. 8. P. 1777–1784. DOI: 10.1063/1.1762357.
- 17. Бочкарев А. А., Ребров А. К., Тимошенко Н. И. Структура ударной волны в смеси Аг-Не // Известия Сибирского отделения Академии наук СССР. Серия технических наук. 1976. № 3. Вып. 1. С. 76–80.
- Kosuge S., Kuo H.-W., Aoki K. A kinetic model for a polyatomic gas with temperaturedependent specific heats and its application to shock-wave structure // Journal of Statistical Physics. 2019. Vol. 177. P. 209–251. DOI: 10.1007/s10955-019-02366-5.
- 19. Kinetic models for thermodynamic non-equilibrium effects of polyatomic gases and preliminary application in gas-kinetic unified algorithm / Wu J., Peng A., Li Z., Jiang X. // AIP Conference Proceedings. 2019. Vol. 2132. Iss. 1. P. 060006. DOI: 10.1063/1.5119546.
- 20. Рыков В. А. Модельное кинетическое уравнение для газа с вращательными степенями свободы // Известия Академии наук СССР. Механика жидкости и газа. 1975. № 6. С. 107–115.
- 21. Никитченко Ю. А. Модельное кинетическое уравнение многоатомных газов // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2017. Т. 57. № 11. С. 1882–1894. DOI: 10.7868/S0044466917110114.
- 22. Никитченко Ю. А., Попов С. А., Сергеева Н. И. Система модельных кинетических уравнений для многокомпонентного газа // Теплофизика высоких температур. 2023. Т. 61. № 5. С. 736–743. DOI: 10.31857/S0040364423050113.

REFERENCES

- Demidov I. V., Kuznetsov M. M., Kuleshova Y. D., Tikhonovets A. V. Analytical theory of high-speed nonequilibrium in a binary mixture of gases with a predominant light component. In: *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, vol. 2056, International Conference "Advanced Element Base of Micro- and Nano-Electronics with Using of ToDate Achievements of Theoretical Physics" (MRSU, 20-23 April 2021, Moscow, Russia), article number 012008. DOI: 10.1088/1742-6596/2056/1/012008.
- Kuznetsov M. M., Kuleshova Yu. D., Reshetnikova Yu. G., Smotrova L. V. [Occurrence conditions and high-speed overlap effect value in shocked gases" mixture]. In: *Trudy MAI* (*setevoye nauchnoye izdaniye*) [Electronic journal «Trudy MAI»], 2017, no. 95. Available at: https://mai.ru/upload/iblock/96c/Kuznetsov_Kuleshova_Reshetnikova_Smotrova_rus.pdf (accessed: 10.10.2023).
- 3. Genich A. P., Kulikov S. V., Manelis G. B., Chereshnev S. L. [Distribution of molecular velocities in the front of a shock wave in gas mixtures]. In: *Izvestiya Akademii nauk SSSR. Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid Dynamics], 1990, no. 2, pp. 144–150.
- Kulikov S. V., Ternovaya O. N., Chereshnev S. L. [Specificity of Translational Nonequilibrium in the Shock Wave Front Propagating through a Single-Component Gas]. In: *Khimicheskaya fizika* [Soviet Journal of Chemical Physics], 1993, vol. 12, no. 3, pp. 340– 342.
- 5. Kuznetsov M. M., Matveev S. V., Molostvin E. V., Reshetnikova Yu. G., Smotrova L. V. [The Hight Velocity Translation Nonequilibium in Analitical Shock Wave Model in a Gas

Mixture]. In: *Fiziko-khimicheskaya kinetika v gazovoy dinamike* [Physical and Chemical Kinetics in Gas Dynamics], 2016, vol. 17, no 1. Available at: http://chemphys.edu.ru/issues/2016-17-1/articles/613/ (accessed: 10.10.2023).

- Kuznetsov M. M., Kuleshova Yu. D., Smotrova L. V, Reshetnikova Yu. G. [On the maximum effect of high translational nonequilibrium in the shock wave]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta*. *Seriya: Fizika-matematika* [Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics], 2016, no. 3, pp. 84– 95. DOI: 10.18384/2310-7251-2016-3-84-95.
- 7. 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], 1997, no. 4, pp. 171–178.
- 8. Raines A. A. Study of a shock wave structure in gas mixtures on the basis of the Boltzmann equation. In: *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 2002, vol. 21, iss. 5, pp. 599–610. DOI: 10.1016/S0997-7546(00)00133-3.
- Sabouri M., Darbandi M. Numerical study of species separation in rarefied gas mixture flow through micronozzles using DSMC. In: *Physics of Fluids*, 2019, vol. 31, iss. 4, pp. 042004. DOI: 10.1063/1.5083807.
- Oguchi H. A kinetic model for a binary mixture and its application to a shock structure. In: Brundin C. L., ed. *Rarefied Gas Dynamics. Vol. 1.* New York, London, Academic Press, 1967, pp. 745–758.
- Abe K., Oguchi H. Shock wave structure in binary gas mixture. In: Trilling L., Wachman H. Y., eds. *Rarefied Gas Dynamics. Vol. 6*. New York, London, Academic Press, 1969, pp. 425–429.
- 12. Todorova B. N., Steijl R. Derivation and numerical comparison of Shakhov and ellipsoidal statistical kinetic models for a monoatomic gas mixture. In: *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 2019, vol. 76, pp. 390–402 DOI: 10.1016/j.euromechflu.2019.04.001.
- 13. Lorenzani S. A microchannel flow application of a linearized kinetic Bhatnagar-Gross-Krook-type model for inert gas mixtures with general intermolecular forces. In: *Physics of Fluids*, 2019, vol. 31, iss. 7, pp. 072001. DOI: 10.1063/1.5098013.
- 14. Todorova B. N., White C., Steijl R. Modeling of nitrogen and oxygen gas mixture with a novel diatomic kinetic model. In: *AIP Advances*, 2020, vol. 10, iss. 9, pp. 095218. DOI: 10.1063/5.0021672.
- Harnett L. M., Muntz E. P. Experimental investigation of normal shock wave velocity distribution functions in mixtures of Argon and Helium. In: *Physics of Fluids*, 1972, vol. 15, iss. 4, pp. 565–572. DOI: 10.1063/1.1693949.
- 16. Center R. E. Measurements of shock-wave structure in helium-argon mixtures. In: *Physics of Fluids*, 1967, vol. 10, iss. 8, pp. 1777–1784. DOI: 10.1063/1.1762357.
- Bochkarev A. A., Rebrov A. K., Timoshenko N. I. [Structure of a shock wave in an Ar-He mixture]. In: *Izvestiya Sibirskogo otdeleniya Akademii nauk SSSR. Seriya tekhnicheskikh nauk* [Proceedings of the Siberian Branch of the USSR Academy of Sciences. Engineering Science Series], 1976, no. 3, iss. 1, pp. 76–80.
- Kosuge S., Kuo H.-W., Aoki K. A kinetic model for a polyatomic gas with temperaturedependent specific heats and its application to shock-wave structure. In: *Journal of Statistical Physics*, 2019, vol. 177, pp. 209–251. DOI: 10.1007/s10955-019-02366-5.
- 19. Wu J., Peng A., Li Z., Jiang X. Kinetic models for thermodynamic non-equilibrium effects of polyatomic gases and preliminary application in gas-kinetic unified algorithm. In: *AIP Conference Proceedings*, 2019, vol. 2132, iss. 1, pp. 060006. DOI: 10.1063/1.5119546.

ISSN 2949-5083

- Rykov V. A. [Model kinetic equation for gas with rotational degrees of freedom]. In: Izvestiya Akademii nauk SSSR. Mekhanika zhidkosti i gaza [Fluid Dynamics], 1975, no. 6, pp. 107–115.
- Nikitchenko Yu. A. [Model kinetic equation of polyatomic gases]. In: *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki* [Computational Mathematics and Mathematical Physics], 2017, vol. 57, no. 11, pp. 1882–1894. DOI: 10.7868/S0044466917110114.
- 22. Nikitchenko Yu. A., Popov S. A., Sergeeva N. I. [System of model kinetic equations for a multicomponent gas]. In: *Teplofizika vysokikh temperature* [High Temperature], 2023, vol. 61, no. 5, pp. 736–743. DOI: 10.31857/S0040364423050113.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Никитченко Юрий Алексеевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Аэродинамика, динамика и управление летательных аппаратов» Московского авиационного института (национального исследовательского университета); e-mail: nikitchenko7@yandex.ru

Сергеева Наталья Ивановна – аспирант кафедры «Аэродинамика, динамика и управление летательных аппаратов» Московского авиационного института (национального исследовательского университета); e-mail: natasg777@yandex.ru

INFORMATION ABOUT AUTHORS

Yrii A. Nikitchenko – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Aerodynamics, dynamics and control of aircraft, Moscow Aviation Institute (National Research University); email:nikitchenko7@yandex.ru

Natalya I. Sergeeva – Postgraduate Student, Department of Aerodynamics, dynamics and control of aircraft, Moscow Aviation Institute (National Research University); email: natasg777@yandex.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Никитченко Ю. А., Сергеева Н. И. Модельное кинетическое уравнение для смеси однои многоатомных газов // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. № 1. С. 56–67. DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-56-67.

FOR CITATION

Nikitchenko Yu. A., Sergeeva N. I. Model kinetic equation of mono- and polyatomic gas mixture. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2024, no. 1, pp. 56–67. DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-56-67.

УДК 533.6.011.5 DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-68-82

ЧИСЛЕННОЕ И АНАЛИТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТУРБУЛИЗАЦИИ Сверхзвукового потока вязкого газа

Тугазаков Р. Я.

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

Аннотация

Цель. Построение нелинейной модели турбулизации сверхзвукового потока вязкого газа при обтекании плоской пластины.

Процедура и методы. Применялось численное моделирование в рамках уравнений Навье – Стокса без привлечения моделей турбулентности с использованием этих результатов расчёта для построения аналитического решения.

Результаты. На основе данных прямого численного моделирования уравнений Навье – Стокса объяснён механизм выброса газа (бёрста) С поверхности теплоизолированной пластины, обтекаемой сверхзвуковым потоком газа с М = 2. Показано, что «вязкий подслой» становится неустойчивым, и на обтекаемой поверхности появляются силы, приводящие к отрыву бёрстов с обтекаемой поверхности. Полученные результаты подтверждают экспериментальные данные: выполнение закона подобия частоты образования бёрстов для сверхзвукового потока газа. Также подтверждена реализация В турбулентном пограничном слое резонансного трёхволнового взаимодействия волн, полученного в теоретических работах.

Теоретическая и практическая значимость. Полученные в статье результаты объясняют механизм перехода ламинарного течения в турбулентное на нелинейном уровне, дополняют и уточняют теорию ламинарно-турбулентного перехода, исследованного ранее в рамках слабонелинейного подхода.

Ключевые слова: турбулентный сверхзвуковой поток, бёрст, резонансное трёхволновое взаимодействие

Благодарности. Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 20-01-00184.

NUMERICAL AND ANALYTICAL STUDY OF TURBULENCE OF SUPERSONIC VISCOUS GAS FLOW

R. Tugazakov

Central Aerohydrodynamic Institute ulitsa Zhukovskogo 1, Zhukovsky 140180, Moscow Region, Russian Federation

Abstract

Aim. Building a nonlinear turbulence model of a supersonic viscous gas flow around a flat plate.

[©] СС Тугазаков Р. Я., 2024.

Methodology. Numerical modeling was applied within the framework of the Navier-Stokes equations without using turbulence models; the calculation results then used to build an analytical solution.

Results. Based on the data from direct numerical modeling of the Navier-Stokes equations, the mechanism of gas emission (burst) from the surface of a thermally insulated plate streamlined by a supersonic gas flow with M = 2 is explained. It is shown that the "viscous sublayer" becomes unstable, and forces appear on the streamlined surface, leading to the separation of bursts from the streamlined surface. The results obtained in the article confirm the experimental data: the fulfillment of the law of similarity of the burst formation frequency for supersonic gas flow. The results also confirm the realization of the resonant three-wave interaction of waves in the turbulent boundary layer, obtained in theoretical works.

Research implications. The results obtained in the article explain the mechanism of transition from laminar flow to turbulent flow at the nonlinear level, they complement and refine the theory of laminar -turbulent transition, previously studied within the framework of a weakly nonlinear approach.

Keywords: Turbulent supersonic flow, burst, resonant three-wave interaction

Acknowledgments. The work was carried out within the framework of RFBR grant No. 20-01-00184.

Введение

Существуют десятки работ, посвящённых изучению ламинарнотурбулентного перехода в дозвуковых и сверхзвуковых течениях газа при обтекании плоской пластины [1-12; 14-16]. Авторы большинства этих работ, полученных экспериментальным путём или численным моделированием течения газа в рамках уравнений Навье – Стокса, стремятся подтвердить теоретические результаты, открытые в слабонелинейном подходе в рамках теории гидродинамической неустойчивости. Основной вывод, полученный в теоретических работах, заключается в том, что в рамках слабонелинейного подхода наибольший нелинейный вклад в развитие неустойчивых возмущений в сдвиговых течениях должно давать резонансное трёхволновое взаимодействие [2]. То есть на нелинейной стадии развития возмущение растёт, как правило, взрывным образом. Слабонелинейный же подход в пространстве частот описывает возникновение градиентной катастрофы, которая может привести к ламинарно-турбулентному переходу. Но саму картину перехода реального течения можно описать только в нелинейной постановке. Этому и посвящена данная работа.

1. Постановка задачи

На рис. 1 приведена картина обтекания прямоугольной пластины сверхзвуковым потоком вязкого газа (где z – продольная, x – поперечная, y – нормальная координаты; w, u, v – компоненты скорости вдоль этих координат). Начало декартовой системы координат располагается на острой передней кромке плоской пластины. Ось z совпадает с направлением вектора скорости w_{∞} невозмущённого сверхзвукового потока, ось y направлена по нормали к



Рис. 1 / Fig. 1. Схема расчётной области обтекания пластины / Diagram of the calculated flow area of the plate

Источник: по данным автора

Затем на скорость набегающего потока w_{∞} накладывается плоская гармоническая волна интенсивности $\Delta p = 0,005 - 0,01 \, p_{\infty}$ с длиной λ , которая выбирается из условия максимального резонансного усиления внешних волн (в зависимости от числа М, толщины слоя, длины волны и ширины пластины). Число Re, определённое по длине пластины, для пространственного расчёта имеет порядок ~ 106. Рассматривается симметричная задача по оси у, т.е. приводятся картины обтекания одной поверхности пластины. На выходной границе и в трансверсальном направлении задаются неотражающие граничные условия. Результаты получаются прямым численным моделированием течения в рамках уравнений Навье - Стокса, без привлечения схем турбулентности; используется явная двухшаговая разностная схема [13]. Приведённые на фигурах геометрические размеры отнесены к длине пластины; давление р, плотность R отнесены к их значениям в набегающем потоке, а компоненты скорости – к скорости звука невозмущённого потока. Первоначально рассчитывается обтекание теплоизолированной пластины газом со скоростью w_{∞} и параметрами: $p_{\infty} = 1$ атм, $T_{\infty} = 278$ К, $R_{\infty} = 1,25$ к $\Gamma c^2/M^4$, $\mu_{\infty} = 1,72 \times 10^{-5}$ к $\Gamma c/M^2$, число Прандтля Pr = 0,72 для набегающего потока с числом M = 2. После реализации в задаче ламинарно-турбулентного перехода взрывным образом изучается спектр турбулентного течения на теплоизолированной части пластины и на участке пластины, граница которого начинается после линии АВ (рис. 1), охлаждённой до низкой температуры.

2. Результаты расчётов

Результаты обтекания пластины потоком газа с числом M = 2 представлены на рис. 2.

2024 / № 1

2024 / № 1

Здесь на рис. 2*а* приведена картина распределения давления на пластине, когда на набегающий поток «наложена» плоская гармоническая волна с частотой 780 кГц. Длина волны взята в два раза больше толщины ламинарного пограничного слоя, что обеспечивает максимальное усиление набегающих возмущений [10]. Интенсивность набегающей волны мала, так что течение в начальной части пластины почти квазидвумерное. На рис. 2*б* видно, что переход от ламинарного к турбулентному потоку происходит почти по линейному закону. В центральном продольном сечении величины давления и энтропии постепенно подрастают. Температура почти постоянна. При турбулизации потока все параметры увеличиваются, что соответствует экспериментальным [5–7] и численным [8; 14] данным.



Рис. 2 / Fig. 2. Распределение параметров течения на поверхности пластины: начальная стадия турбулизации потока, разрушение первоначальных внешних возмущений при z > 0,8 (*a*); газодинамические величины s – кривая (1), T (2), p (3), коэффициент поверхностного трения c_f (4) на пластине в областях ламинарного и турбулентного течений (6) / Distribution of flow parameters on the plate surface: the initial stage of flow turbulence, destruction of initial external disturbances at z > 0,8 (*a*); gas dynamic values s – curve (1), T (2), p (3), surface friction coefficient c_f (4) on the plate in the laminar and turbulent currents (6).

Источник: [14].

Переход от ламинарного течения к турбулентному происходит при z = 0,8, когда величина p_+ становится меньше p_{∞} . Здесь p_+ – величина давления на пластине, медленно меняющаяся с ростом числа Re. При выполнении указанного условия (Re ~ 10⁶) из-за нелинейной неустойчивости происходит взрывной переход от ламинарного характера течения к турбулентному.

. 71 /
2024 / № 1

Набегающие волны здесь разрушаются образующимися с собственной частотой интенсивными пульсациями. Образуются характерные для переходного периода пространственные турбулентные пятна различного размера. Появление структур в продольных и поперечных сечениях картины течения показано далее.

2.1. Картина течения в продольном центральном сечении расчётного поля

На рис. 3 приведены мгновенные картины распределения параметров течения в продольном центральном сечении расчётного поля (плотности, давления и нормальной компоненты скорости).



Рис. 3 / **Fig. 3.** Картины течения газа внутри пограничного слоя: поле давления (*a*); нормальная компонента скорости (*б*); квазипериодические выбросы вязкой жидкости из пристенной области – «бёрсты» (*в*) / Gas flow patterns inside the boundary layer: pressure field (*a*); normal velocity component (*б*); quasiperiodic emissions of viscous liquid from the wall area – "bursts" (*в*)

Источник: [9].

Результаты представлены в момент, когда на участке z > 0,65 установилось развитое турбулентное течение. На рис. За (поле давления) видно, как на внешней границе пограничного слоя в результате воздействия на него пульсаций давления образуются вихри разных знаков, которые способствуют обмену газов из вязкого слоя с внешним потоком и обратному обмену. Нелинейный механизм образования вихрей на сдвиговых слоях в сверхзвуковых

течениях (неустойчивость Кельвина – Гельмгольца), представлен в [10]. На рис. Зб приведено поведение пульсаций компоненты скорости v, нормальной к поверхности пластины, диапазон изменения которых находится в пределах $-0,6 \div 0,3$. То есть происходит непрерывное движение газа к пластине и от неё. Максимальное значение v принимает на внешней границе пограничного слоя в вершинах бёрстов – квазипериодических выбросов вязкой жидкости из пристенной области. В результате выбросов газа во внешнем поле образуются наклонные волны малой интенсивности. На рис. Зв представлена более подробная картина образования бёрстов (поле поперечной компоненты вихря), начиная с z > 0,65, когда проявляется неустойчивость вязкого подслоя.

2.2. Закон подобия частоты образования бёрстов

Численное исследование процесса перехода ламинарного течения в турбулентное требует подтверждения основных положений, полученных ранее в эксперименте. В частности, в эксперименте [11; 12] при изучении квазипериодических выбросов жидкости из пристенной области течения получен закон подобия средней периодичности бёрстов: $TU_{\infty}/\delta = 6 \pm 2$, где T – средний период бёрстов, δ – толщина турбулентного течения, U_{∞} – скорость набегающего потока. Этот закон подобия получен для дозвуковых течений.

В настоящей работе при обтекании плоской пластины сверхзвуковым потоком газа (M = 2) получается картина течения, представленная на рис. Зв. Видно, что при $z \approx 0,65$ начинается нелинейный переход ламинарного течения в турбулентное.

Для получения закона подобия в реальном нестационарном течении проведены расчёты, описывающие картины образования бёрстов для двух моментов времени (рис. 4), взятых через 1600 временных шагов. В результате получены данные, которые позволяют сформулировать закон подобия. На рис. 4 светлые линии 1 и 2 соответствуют положению бёрста в момент t_1 и t_2 , где $T = t_2 - t_1 = 1600 \times 1.7 \times 10^{-9} \text{ с} = 2.72 \times 10^{-6} \text{ с}$. Тогда расчёты показывают: $TU_{\infty}/\delta = 2.72 \times 10^{-6} \times 660/30 \times 10^{-5} = 5.98$. Скорость бёрста для данного варианта задачи находится из отношения пути (отмечены на рис. 46 тёмными линиями), пройденного бёрстом, ко времени T: $v_b = 100 \times 10^{-5}/2.72 \times 10^{-6} = 370 \text{ м/с}$. То есть, так как плотность на пластине меньше R_{∞} , то скорость бёрста больше 330 м/с.

Таким образом, закон подобия выполняется и при сверхзвуковом обтекании пластины. Это объясняется тем, что образование бёрстов начинаются на пластине в вязком дозвуковом подслое. Картина их образования в поперечных сечениях (в турбулентной части течения) приведена на рис. 5. На рис. 5*a* и 5*b* видны головка бёрста и его «ноги». При движении по потоку бёрст всплывает от поверхности. Когда головка бёрста начинает взаимодействовать с внешней границей турбулентного пограничного слоя, она распадается на ряд вихрей, которые опускаются ниже в турбулентную область, захватывая газ из внешнего потока.

73 /



Рис. 4 / **Fig. 4**. Поведение бёрстов (поперечные компоненты вихря) в продольном сечении для двух моментов времени $t_1(a)$ и $t_2(b)$. Светлые вертикальные прямые соответствуют расположению бёрста в данный момент / The behavior of the bursts (transverse components of the vortex) in the longitudinal section for two time points $t_1(a)$ and $t_2(b)$. The light vertical lines correspond to the location of the burst at the moment

Источник: Жаров В. А., Тугазаков Р. Я. Динамика пограничного слоя в сжимаемом газе. Численное моделирование // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 2022. № 2. С. 99.



Рис. 5 / **Fig.** 5. Развитие бёрстов в поперечном направлении: (*a*), (*b*) – рост бёрста по координате *z*; (*b*), (*z*) – погружение бёрста в турбулентную область при взаимодействии его с внешней границей турбулентного пограничного слоя / The development of bursts in the transverse direction: (*a*), (*b*) – the growth of the burst along the *z* coordinate; (*b*), (*z*) – the immersion of the burst into a turbulent region when interacting with the outer boundary of the turbulent boundary layer

Источник: Жаров В. А., Тугазаков Р. Я. Динамика пограничного слоя в сжимаемом газе. Численное моделирование // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 2022. № 2. С. 100.

В работе [9] показано, что при обтекании плоской пластины сверхзвуковым вязким потоком газа на последней стадии перехода в потоке реализуются нестационарные силы, вызывающие микроотрывы газа от поверхности пластины. Данный сценарий образования бёрстов напоминает схему образования вихрей в невязком потоке газа. Опишем процесс образования сил, способствующих отрыву невязкого газа от обтекаемой поверхности.

2.3. Силы, вызывающие отрыв идеального газа в нестационарных и пространственных течениях

Отрыв потока газа от обтекаемой поверхности происходит под действием сил, возникающих в области течения. Это – вязкие силы в реальном потоке газа (рис. 6*a*) и силы инерции в невязком потоке (рис. 6*b*, 6*c*). Теория отрыва нестационарного потока идеального газа при обтекании выпуклого угла построена в работе [15], где найдены значения углов, при котором происходит отрыв потока для данного числа Маха набегающего потока. Теоретические и численные исследования по отрывному обтеканию сверхзвуковым потоком идеального газа V-образного крыла в режиме больших углов атаки (M = 2...4) как при угле скольжения, так и без него, приведены в работах [15; 16]. Здесь для крыла с углом раскрытия между консолями 90° аналитически получены условия отрыва потока идеального газа от наветренной поверхности консоли.



Рис. 6 / Fig. 6. Схемы отрыва потока газа от обтекаемой поверхности / Diagrams of the separation of the gas flow from the streamlined surface Источник: [15].

В данной работе приводится обобщённая схема течения, по которой происходит отрыв потока газа в идеальном газе. Задача решается в двумерной постановке в автомодельных переменных. Видно, что при столкновении потоков (рис. 66) образуются области 3 и 4, где производная нормальной

、75 /

скорости к поверхности Vy (рис. 6в) может при определённых условиях иметь разные знаки. В этом случае в области 3 давление растёт, а в области 4 – падает. Реализуется отрыв газа в точке Е, так как появляется сила, закручивающая контактный разрыв. Образуется вихрь F, который всплывает над поверхностью (рис. 6г) вместе с газом. Данная схема отрыва потока газа от поверхности реализуется и в стационарном пространственном сверхзвуковом обтекании крыла. На рис. 7*a* и 7*б* для начальных параметров задачи M = 3, $\alpha = -35^\circ$, $\beta = 13^\circ$ представлены результаты обтекания V-крыла, когда на наветренной стороне консоли при столкновении потоков газа происходит отрыв в виде всплытия вихревой особенности Ферри (точка S). Здесь представлены общая картина течения (рис. 7а) и фрагменты поля изэнтроп (рис. 7б). Распределение газодинамических функций по поверхности консоли В поперечном направлении, совпадающее с экспериментальными данными [16], представлено на рис. 7в, где вертикальной линией отмечена граница отрыва. Видно, что в области отрыва реализуется локальный максимум давления Р (кривая 1), плотность ρ (2) и энтропия S (3) меняются скачком, а поперечная скорость *и* (4) = 0.





Flow around a *V*-wing with the formation of separation in the form of the ascent of the Ferry vortex singularity (point *S*), when gas flows collide on the windward side of the console Источник: [15].

2.4. Механизм образования бёрста

Результаты работ [10; 14] позволяют в рамках полного нелинейного взаимодействия сформулировать условие, при котором в данной задаче происходит переход от ламинарного течения к турбулентному. На рис. 8 ISSN 2949-5083

показано распределение параметров течения в случае, когда реализуется резонансное трёхволновое взаимодействие волн и появляется условие для образования бёрста.



Рис. 8 / Fig. 8. Реализация резонансного трёхволнового взаимодействие волн; создание условия для образования бёрста / Realization of resonant three-wave interaction; burst creation condition is met

Источник: [9].

Вдоль распространяется пластины плоская гармоническая волна определённой длины, интенсивность которой определяется начальной амплитудой ±а. При движении вдоль пластины и увеличении числа Рейнольдса вследствие линейной неустойчивости интенсивность волны увеличивается. Сначала на пластине устанавливается течение с ламинарным пограничным слоем, в котором давление равно $P = P_{\infty} + \varepsilon$ (ε – малая величина, первоначально превышающая mod a). При наложении на течение внешней волны суммарная текущая величина давления, которое действует на вязкий подслой на пластине, равна $P_+ = P_{\infty} + \varepsilon \pm a$. Поскольку mod *a* растёт, при больших значениях Re возможны два случая: $P_+ > P_{\infty}$ или $P_+ < P_{\infty}$. В первом случае давление незначительно сжимает пограничный слой, толщина его уменьшается, и течение является устойчивым. Вследствие действия градиента давления по нормали к пластине появляется отрицательный градиент нормальной скорости. Во втором случае на вязкий подслой действует давление, меньшее, чем во внешнем потоке, и образуется положительный градиент нормальной скорости, который стремится оттеснить поток от пластины. В этом случае течение в вязком подслое неустойчиво, и возникают силы, аналогичные тем, которые вызывают отрыв невязкого потока газа от обтекаемой поверхности [15]. Применение теории невязкого отрыва здесь объясняется ничтожным влиянием вязких сил на поверхности пластины. И в то же время, действием интенсивных волн, усилившихся из-за линейной неустойчивости при увеличении числа Re. В соответствии с результатами работы [15] граница положительной и

. 77 /

отрицательной фаз (рис. 8) на поверхности пластины сворачивается в микровихрь (бёрст), который отрывается от поверхности вместе с потоком. Неустойчивость течения в вязком подслое приводит к его перестройке. Таким образом, имеем классическую задачу о распаде произвольного разрыва. В пространственном случае эта задача не имеет аналитического решения, однако использование данных численного эксперимента позволяет представить картину перехода при выполнении условия mod $a > \varepsilon$.

2.5. Стохастизация течения и переход к турбулентности

По спектру можно проследить развитие процесса стохастизации. На рис. 9 представлен спектр пульсаций давления однородно нагретой пластины с указанием относительной величины частоты соответствующих составляющих: по горизонтали отложена частота в условных единицах, по вертикали – квадрат модуля амплитуды пульсаций давления. Длина реализации по времени в расчётах составляет порядка 100 расчётных шагов. Этот спектр подтверждает субгармонический-гармонический сценарий перехода. Действительно, если за основу взять частоту f = 2,934, то близкая к ней субгармоническая частота равна f = 1,331. Видны также кратные частоты. Сравнение спектра пульсаций давления на пластине в зависимости от температуры охлаждения показывает, что с изменением температуры пластины характер сценария развития пульсаций сохраняется (субгармонический-гармонический), но спектр частот становится уже.



Рис. 9 / Fig. 9. Влияние температуры пластины на спектр пульсаций давления: температура пластины $T = 0.83T_w(a)$, охлаждённая часть пластины: $T = 0.5T_w(b)$ / The effect of plate temperature on the pressure pulsation spectrum: plate temperature $T = 0.83T_w(a)$, cooled part of the plate: $T = 0.5T_w(b)$

Источник: Жаров В. А., Тугазаков Р. Я. Динамика пограничного слоя в сжимаемом газе. Численное моделирование // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 2022. № 2. С. 102.

Анализ поведения величины плотности и давления в зависимости от температуры пластины (рис. 9) показывает, что из-за разности температуры в носовой ($T = 0.83T_w$) и кормовой ($T = 0.5T_w$) частях пластины перед носиком охлаждённой части пластины в дозвуковой области течения образуется тангенциальный разрыв, который в области сверхзвукового течения слабую ударную волну. Взаимодействие набегающего превращается в турбулентного потока с тангенциальным разрывом и ударной волной приводит к размыванию этих разрывов и, в то же время, частичному разрушению вихрей, бёрстов [15; 17].

Заключение

В нелинейной постановке построена модель ламинарно-турбулентного перехода сверхзвукового потока газа. Точность результатов подтверждается выполнением закона подобия частоты образования бёрстов и резонансного трёхволнового взаимодействия волн, полученных в работе. Аналитические и численные данные совпадают с экспериментальными результатами. Показано, что влияние температуры на теплоизолированную и охлаждённую части пластины соответствует изменению характера течения в пространстве и спектральном составе потока.

Статья поступила в редакцию 15.01.2024г.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Гапонов С. А., Маслов А. А. Развитие возмущений в сжимаемых потоках. Новосибирск: Наука, 1980. 134 с.
- 2. Kachanov Yu. S. On the resonant nature of the breakdown of a laminar boundary layer // Journal of Fluid Mechanics. 1987. Vol. 184. P. 43–74. DOI: 10.1017/S0022112087002805.
- 3. Жаров В. А. О волновой теории развитого турбулентного пограничного слоя // Ученые записки ЦАГИ. 1986. Т. XVII. № 5. С. 28–38.
- 4. Дорофеев Ф. Е. Эффект изменения знака подъёмной силы для степенных тел вращения // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2022. № 2. С. 42–50. DOI: 10.18384/2310-7251-2022-2-42-50.
- Late-Stage Transitional Boundary-Layer Structures. Direct Numerical Simulation and Experiment / Borodulin V. I., Gaponenko V. R., Kachanov Y. S., Meyer D. G. W., Rist U., Lian Q. X., Lee C. B. // Theoretical and Computational Fluid Dynamics. 2002. Vol. 15. P. 317–337. DOI: 10.1007/s001620100054.
- 6. Репик Е. У., Соседко Ю. П. Турбулентный пограничный слой. Методика и результаты экспериментальных исследований. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. 312 с.
- Experiments on relative receptivity of three-dimensional supersonic boundary layer to controlled disturbances and its development / Kosinov A. D., Panina A. V., Kolosov G. L., Semionov N. V., Ermolaev Yu. G. // EUCASS Proceedings Series. 2013. Vol. 5: Progress in Flight Physics. P. 69–80. DOI: 10.1051/eucass/201305069.
- 8. Кудрявцев А. Н., Хотяновский Д. В. Прямое численное моделирование перехода к турбулентности в сверхзвуковом пограничном слое // Теплофизика и аэромеханика. 2015. Т. 22. № 5. С. 581–590.

- 9. Липатов И. И., Тугазаков Р. Я. Механизм образования бёрстинга при обтекании узкой пластины сверхзвуковым потоком газа // Прикладная механика и техническая физика. 2022. Т. 63. № 2 (372). С. 37–47 DOI: 10.15372/PMTF20220204.
- Lipatov I. I., Tugazakov R. Ya. Generation of Coherent Structures in Supersonic Flow past a Finite-Span Flat Plate // Fluid Dynamics. 2015. Vol. 50. No 6. P. 793–799. DOI: 10.1134/S0015462815060095.
- Kline S. J., Reynolds W. C., Shraub F. A., Runstadler P. W. The structure of turbulent boundary layers // Journal of Fluid Mechanics. 1967. Vol. 30. Iss. 4. P. 741–773. DOI: 10.1017/S0022112067001740.
- 12. Cantuwell D. J. Organaized motion in turbulent flow // Annual Review of Fluid Mechanics. 1981. Vol. 13. P. 457–515. DOI: 10.1146/annurev.fl.13.010181.002325.
- Ephraim L. R., Burstein S. Z. Difference methods for the inviscid and viscous equations of a compressible gas // Journal of Computational Physics. 1967. Vol. 2. Iss. 2. P. 178–196. DOI: 10.1016/0021-9991(67)90033-2.
- 14. Tugazakov R. Ya. Three-dimensional Turbulent Supersonic Flow over a Plate // Fluid Dynamics. 2019. Vol. 54. No. 5. P. 705–713. DOI: 10.1134/S0015462819050100.
- 15. Тугазаков Р. Я. К теории отрыва сверхзвукового потока невязкого газа в задачах газодинамики // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 2016. № 5. С. 118–124. DOI: 10.7868/S0568528116040137.
- 16. Остапенко Н. А., Симоненко А. М. V-образное крыло в сверхзвуковом потоке под углами атаки и скольжения // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 2004. № 1. С. 97–109.
- 17. Кузнецов М. М., Эффект Кулешова Ю. Д., Смотрова Л. В. высокоскоростной поступательной неравновесности в бимодальной ударной волне // Вестник университета. Серия: Московского государственного областного Физикаматематика. 2012. № 2. С. 108-116.

REFERENCES

- 1. Gaponov S. A., Maslov A. A. *Razvitiye vozmushcheniy v szhimayemykh potokakh* [Development of disturbances in compressible flows]. Novosibirsk, Nauka Publ., 1980. 134 p.
- 2. Kachanov Yu. S. On the resonant nature of the breakdown of a laminar boundary layer. In: *Journal of Fluid Mechanics*, 1987, vol. 184, pp. 43–74. DOI: 10.1017/S0022112087002805.
- 3. Zharov V. A. [On the wave theory of a developed turbulent boundary layer]. In: *Uchenyye zapiski TSAGI* [Scientific notes of Central Aerohydrodynamic Institute], 1986, vol. XVII, no. 5, pp. 28–38.
- Dorofeyev F. Ye. [Effect of a change in the sign of the lifting force for power-law bodies of revolution]. In: Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-matematika [Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics], 2022, no. 2, pp. 42–50. DOI: 10.18384/2310-7251-2022-2-42-50.
- Borodulin V. I., Gaponenko V. R., Kachanov Y. S., Meyer D. G. W., Rist U., Lian Q. X., Lee C. B. Late-Stage Transitional Boundary-Layer Structures. Direct Numerical Simulation and Experiment. In: *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 2002, vol. 15, pp. 317– 337. DOI: 10.1007/s001620100054.
- 6. Repik Ye. U., Sosedko Yu. P. *Turbulentnyy pogranichnyy sloy. Metodika i rezul'taty eksperimental'nykh issledovaniy* [Turbulent boundary layer. Methodology and results of experimental studies]. Moscow, FIZMATLIT Publ., 2007. 312 p.

- Kosinov A. D., Panina A. V., Kolosov G. L., Semionov N. V., Ermolaev Yu. G. Experiments on relative receptivity of three-dimensional supersonic boundary layer to controlled disturbances and its development. In: *EUCASS Proceedings Series*, 2013, vol. 5: Progress in Flight Physics, pp. 69–80. DOI: 10.1051/eucass/201305069.
- Kudryavtsev A. N., Khotyanovskiy D. V. [Direct numerical simulation of transition to turbulence in a supersonic boundary layer]. In: *Teplofizika i aeromekhanika* [Thermophysics and Aeromechanics], 2015, vol. 22, no. 5, pp. 581–590.
- 9. Lipatov I. I., Tugazakov R. Ya. [Mechanism of bursting formation in a supersonic gas flow past a narrow flat plate]. In: *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika* [Journal of Applied Mechanics and Technical Physics], 2022, vol. 63, no. 2 (372), pp. 37–47 DOI: 10.15372/PMTF20220204.
- Lipatov I. I., Tugazakov R. Ya. Generation of Coherent Structures in Supersonic Flow past a Finite-Span Flat Plate. In: *Fluid Dynamics*, 2015, vol. 50, no 6, pp. 793–799. DOI: 10.1134/S0015462815060095.
- Kline S. J., Reynolds W. C., Shraub F. A., Runstadler P. W. The structure of turbulent boundary layers. In: *Journal of Fluid Mechanics*, 1967, vol. 30, iss. 4, pp. 741–773. DOI: 10.1017/S0022112067001740.
- 12. Cantuwell D. J. Organaized motion in turbulent flow. In: *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1981, vol. 13, pp. 457–515. DOI: 10.1146/annurev.fl.13.010181.002325.
- 13. Ephraim L. R., Burstein S. Z. Difference methods for the inviscid and viscous equations of a compressible gas. In: *Journal of Computational Physics*, 1967, vol. 2, iss. 2, pp. 178–196. DOI: 10.1016/0021-9991(67)90033-2.
- 14. Tugazakov R. Ya. Three-dimensional Turbulent Supersonic Flow over a Plate. In: *Fluid Dynamics*, 2019, vol. 54, no. 5, pp. 705–713. DOI: 10.1134/S0015462819050100.
- 15. Tugazakov R. Ya. [To the theory of separation of a supersonic flow of inviscid gas in problems of gas dynamics]. In: *Izvestiya RAN. Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid Dynamics], 2016, no. 5, pp. 118–124. DOI: 10.7868/S0568528116040137.
- Ostapenko N. A., Simonenko A. M. [Supersonic flow around a v-shaped wing at incidence and yaw]. In: *Izvestiya RAN. Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid Dynamics], 2004, no. 1, pp. 97–109.
- 17. Kuznetsov M. M., Kuleshova Yu. D., Smotrova L. V. [On the increase of the kinetic processes rates in tamm-mott-smith shock wave model]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Fizika-matematika* [Bulletin of Moscow Region State University. Series: *Physics and Mathematics*], 2012, no. 2, pp. 108–116.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ

Тугазаков Ренат Ямилович – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Центрального аэрогидродинамического института имени профессора Н. Е. Жуковского;

e-mail: renatsan@ya.ru

81 /

INFORMATION ABOUT THE AUTHOR

Renat Ya. Tugazakov - Dr. Sci. (Phys.-Math.), Leading researcher, Central Aerohydrodynamic Institute;

e-mail: renatsan@ya.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Тугазаков Р. Я. Численное и аналитическое исследование турбулизации сверхзвукового потока вязкого газа // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. № 1. С. 68–82. DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-68-82

FORCITATION

Tugazakov R. Ya. Numerical and analytical study of turbulence of supersonic viscous gas flow. In: Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics, 2024, no. 1, pp. 68-82.

DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-68-82.

Для заметок	



ВЕСТНИК ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА ПРОСВЕЩЕНИЯ

СЕРИЯ: ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА 2024. № 1

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 70х108/₁₆. Бумага офсетная. Печать офсетная. Гарнитура "Minion Pro". Тираж 500 экз. Усл. п. л. 5,25, уч.-изд. л. 4. Подписано в печать: 28.03.2024 г. Дата выхода в свет: 21.05.2024 г. Заказ № 2024/03-12. Отпечатано в Государственном университете просвещения 105005, г. Москва, ул. Радио, д. 10А, стр. 1