

МНАУС

2024

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
НЕРАВНОВЕСНЫХ,
АДАПТИВНЫХ И
УПРАВЛЯЕМЫХ
СИСТЕМ – 2024**

**Красноярск
2024**

Министерство науки и высшего образования РФ
Сибирское отделение РАН
Сибирский федеральный университет
Институт вычислительного моделирования СО РАН
Институт систем энергетики им. Л. А. Мелентьева СО РАН
Институт физики СО РАН

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
НЕРАВНОВЕСНЫХ, АДАПТИВНЫХ И
УПРАВЛЯЕМЫХ СИСТЕМ-2024**

МАТЕРИАЛЫ
ДВАДЦАТЬ СЕДЬМОГО ВСЕРОССИЙСКОГО СЕМИНАРА
4 октября 2024 года

Красноярск 2024

УДК 001.126 (571.51) (043)

М 74

Моделирование неравновесных, адаптивных и управляемых систем: Материалы XXVII Всероссийского семинара, / Под ред. М.Г. Садовского; отв. за вып. М.Ю. Сенашова; – Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук, 2024. –103 с.

В сборнике представлены материалы XXVII Всероссийского семинара «Моделирование неравновесных, адаптивных и управляемых систем» (МНАУС–2024), проходившего в городе Красноярске 4 октября 2024 г.

Проблема моделирования неравновесных систем – одна из важнейших современных научных проблем на стыке математического моделирования, физики, химии, биологии, социальных наук. Важнейшим итогом конференции является обмен последними результатами в различных областях моделирования и исследования неравновесных моделей, описывающих самые различные конкретные системы в области химии, биоинформатики, экологии, генетики, биофизики, социологии, демографии, теории управления сложными системами, теории управления рефлексивными системами, политологии. Среди главных достижений конференции – формирование целостного взгляда на подходы в моделировании неравновесных систем различной природы среди участников этой конференции, распространение опыта и новейших методов моделирования и анализа таких систем на более широкие области применимости.

Материалы предназначены для научных работников, преподавателей, студентов и аспирантов соответствующих специальностей.

Конференция проводится при поддержке Красноярского математического центра, финансируемого Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение № 075-02-2024-1378).

Редакционная коллегия:

Садовский Михаил Георгиевич – ответственный редактор

Сенашова Мария Юрьевна – ответственный за выпуск

© ИВМ СО РАН, 2024

© Коллектив авторов, 2024

ISBN 978-5-6047078-9-0



9 785604 707890

ENHANCING WIND TURBINE GEARBOX RELIABILITY: A HYBRID DEEP LEARNING APPROACH FOR PREDICTIVE MAINTENANCE

Х.С.Аль Уатик¹, С.П.Пронин¹

¹Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
Факультет информационных технологий, каф. Информационных технологий,
alh@dr.com, sppronin@mail.ru

Abstract

This study explores the application of deep learning models for predictive maintenance of wind turbine gearboxes. We investigate Convolutional Neural Networks (CNN), Long Short-Term Memory (LSTM) networks, and a novel Hybrid model combining neural networks with Random Forest classifiers. The models are trained on engineered features derived from wind turbine operational data. Results show that the Hybrid model achieves the highest accuracy (90%) in predicting gearbox failures, outperforming standalone CNN (83.33%) and LSTM (72.22%) models. This approach demonstrates significant potential for improving wind turbine reliability, reducing maintenance costs, and optimizing renewable energy production.

Keywords

predictive maintenance, wind turbines, gearboxes, deep learning, CNN, LSTM, hybrid models

Introduction

Wind energy has become a crucial component of the global transition to renewable energy sources. However, the efficiency and reliability of wind turbines are often compromised by unexpected failures, particularly in critical components such as gearboxes. Predictive maintenance strategies have emerged as a solution to minimize downtime and extend the operational life of these components. This study explores the application of advanced deep learning techniques to predict gearbox failures in wind turbines, aiming to enhance the reliability and cost-effectiveness of wind energy production [3 – 5].

The main objectives of this research are:

a) To develop and compare different deep learning models for gearbox failure

prediction;

b) To propose a novel Hybrid model that combines the strengths of neural networks and traditional machine learning algorithms.

Methodology

Data Analysis and Preprocessing:

The study utilizes a dataset of engineered features extracted from wind turbine operational data, specifically targeting gearbox performance [1]. The preprocessing steps include:

- * Label encoding of the target variable (gearbox failure status);
- * Standardization of the feature set to ensure consistent scale across variables;
- * Data augmentation techniques to enhance model generalization.

Model Architectures

Three main model architectures were developed and evaluated:

1. Convolutional Neural Network (CNN):

The CNN model is designed to capture spatial hierarchies within the engineered features. Batch normalization was also applied to stabilize and speed up the training process:

$$Conv1D(X, W = ReLU(\sum_{i=1}^n X_i \times W_i + b)) \quad (1)$$

Where X is the input data, W are the convolutional filters, and b is the bias term.

Its architecture includes:

- * Multiple convolutional layers with *ReLU* activation;
- * Max-pooling layers for feature reduction;
- * Dropout layers to prevent overfitting;
- * Batch normalization for improved training stability;
- * Dense layers for final classification;

The CNN model is trained for 150 epochs with a learning rate of 0.0001.

2. Long Short-Term Memory (LSTM) Network:

LSTM networks are particularly well-suited for learning long-term dependencies in sequential data, making them ideal for time-series analysis in predictive maintenance. The LSTM model employed in this study consists of a single

LSTM layer followed by dense layers and dropout to prevent overfitting.

$$h_t = o_t \cdot \tanh(C_t) \quad (2)$$

Where o_t is the output gate, C_t is the cell state, and h_t is the hidden state.

The LSTM model is employed to learn long-term dependencies in sequential data. Its structure consists of:

- * A single LSTM layer to process sequential information;
- * Dense layers for feature integration and classification;
- * Dropout for regularization.

The LSTM model is also trained over 150 epochs.

3. Hybrid Model:

The novel Hybrid model combines the strengths of neural networks (either CNN or LSTM) with a Random Forest (RF) classifier. The architecture involves:

- * A neural network component (CNN or LSTM) for feature extraction
- * A Random Forest classifier for final prediction based on the extracted features

$$\text{Hybrid Output} = \text{RF}(\text{CNN}(X) \text{ OR } \text{LSTM}(X)) \quad (3)$$

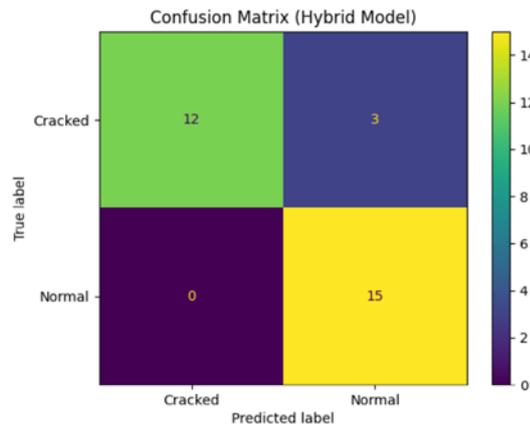


Fig.1. Confusion Matrix for the Hybrid Model

This approach aims to leverage both the feature learning capabilities of neural networks and the robust classification performance of Random Forests. This model benefits from the deep learning network's ability to capture complex feature interactions and the Random Forest's robustness to overfitting. The Hybrid model showed test accuracy of 0.9000, with the confusion matrix presented in Figure 1.

Results and Comparative Analysis

The performance of each model was evaluated using standard metrics including accuracy, precision, recall, and F1-score. The results are summarized as follows:

1. CNN Model:

- * Test Accuracy: 83.33%
- * Strengths: Effective in capturing spatial patterns in the data

2. LSTM Model:

- * Test Accuracy: 72.22%
- * Strengths: Capable of learning temporal dependencies

3. Hybrid Model:

- * Test Accuracy: 90.00%
- * Strengths: Combines the feature learning of neural networks with the robust classification of Random Forests

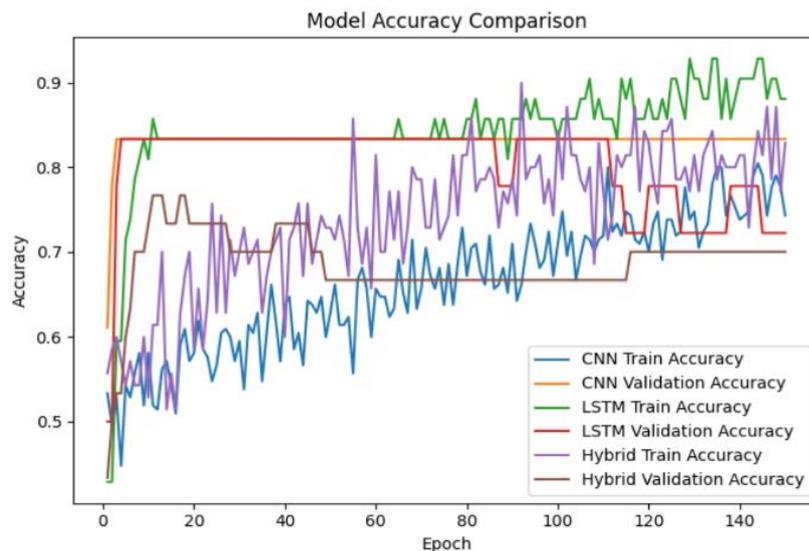


Fig.2. Model Accuracy Comparison

As shown in the Fig.2. the Hybrid model demonstrated superior performance among other models, achieving the highest accuracy while providing a balanced trade-off between predictive power and generalization capability [2].

Real-World Applicability

The developed models, particularly the Hybrid approach, show significant potential for real-world application in wind turbine maintenance:

1. Improved Reliability: Enables timely maintenance interventions, reducing

unexpected breakdowns.

2. **Cost Savings:** Prevents catastrophic failures that require expensive repairs or component replacements.

3. **Scalability:** Can be adapted to different turbine types and operational environments.

4. **Real-time Monitoring:** Provides continuous decision support for maintenance teams.

5. **Customization:** Can be fine-tuned for specific operational conditions or turbine models.

6. **Integration:** Compatible with existing wind turbine monitoring systems.

7. **Long-term Benefits:** Contributes to the optimization of renewable energy production on an industry-wide scale.

Conclusion and Future Work

This study demonstrates the effectiveness of deep learning approaches, particularly a Hybrid model combining neural networks and Random Forests, for predictive maintenance of wind turbine gearboxes. The proposed models show promise in enhancing the reliability and cost-effectiveness of wind energy production.

Future work will focus on:

1. Expanding the feature set to capture more nuanced aspects of turbine operation.

2. Increasing the dataset size to improve model robustness and generalization.

3. Exploring additional hybrid architectures that may further enhance predictive performance.

4. Conducting field trials to validate the models' performance in diverse operational settings.

5. Investigating the integration of these models with IoT and edge computing technologies for real-time, on-site predictive maintenance.

By advancing these predictive maintenance techniques, we aim to contribute to the broader goal of optimizing renewable energy production and accelerating the global transition to sustainable energy sources.

References

1. Al Ouatiq H.S., Pronin. S.P. Data Preprocessing and Feature Engineering for Gearbox Fault Prediction / H.S. Al Ouatiq, S.P. Pronin // Electronic Periodical Scientific Journal "SCI-ARTICLE.RU". — 2024. E-print: <https://sci-article.ru/stat.php?i=1723394394>
2. Dhibi, K. A novel hybrid methodology for fault diagnosis of wind energy conversion systems / K. Dhibi, M. Mansouri, M. Hajji, K. Bouzrara, H. Nounou, M. Nounou // Energy Reports. — 2023. — T.9. — C.5362-5371. <https://doi.org/10.1016/j.egy.2023.04.373>
3. Jiang, G. Wind Turbine Fault Detection Using a Denoising Autoencoder with Temporal Information / G. Jiang, H. He, J. Yan, P. Xie // IEEE/ASME Transactions on Mechatronics. — 2018. — T.23. — №1. — C.89-100. [doi:10.1109/TMECH.2017.2759301](https://doi.org/10.1109/TMECH.2017.2759301)
4. Jiang, G. Wind turbine fault diagnosis based on LSTM with attention mechanism / G. Jiang, P. Xie, H. He, J. Yan // Renewable Energy. — 2021. — T.170. — C.1177-1191. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2021.02.039>
5. Stetco, A. Machine learning methods for wind turbine condition monitoring: A review / A. Stetco, F. Dinmohammadi, X. Zhao, V. Robu, D. Flynn, M. Barnes, J. Keane, G. Nenadic // Renewable Energy. — 2019. — T.133. — C.620-635. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2018.10.047>
6. Xie, Y. Attention Mechanism-Based CNN-LSTM Model for Wind Turbine Fault Prediction Using SSN Ontology Annotation / Y. Xie, J. Zhao, B. Qiang, L. Mi, C. Tang, L. Li, X. Xue // Wireless Communications and Mobile Computing. — 2021. — T.2021. — C.6627588. <https://doi.org/10.1155/2021/6627588>
7. Zhu, A. Condition monitoring of wind turbine based on deep learning networks and kernel principal component analysis / A. Zhu, Q. Zhao, T. Yang, L. Zhou, B. Zeng // Computers and Electrical Engineering. — 2023. — T.105. — C.108538. <https://doi.org/10.1016/j.compeleceng.2022.108538>

НЕРАВНОВЕСНЫЕ СИСТЕМЫ В УПРАВЛЕНИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМИ ПРОЦЕССАМИ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО ПРОИЗВОДСТВА

С.С. Анцыферов, К.Н. Фазилова

МИРЭА – Российский технологический университет,
Институт перспективных технологий и индустриального программирования,
каф. метрологии и стандартизации,
fazilova@mirea.ru

Введение

Одной из основных операций высокотехнологичного производства является механическая обработка изделий, что приводит к износу оборудования. Это означает, что оно пригодно для изготовления лишь ограниченного числа изделий, что, в свою очередь, приводит к необходимости изготовления новой технологической оснастки.

Непрерывный мониторинг состояния технологического оборудования позволяет принимать своевременные меры по его обновлению и, как следствие, повышению износостойкости.

Основой для построения системы мониторинга может служить ранее предложенная математическая модель в виде нелинейного дифференциального уравнения, описывающего динамику изменения состояния оборудования во времени. Данная модель позволяет создавать соответствующие алгоритмы и методики контроля качества как технологических процессов, так и отдельных операций [1, 2].

Цель работы – разработка и практическая апробация системы мониторинга состояния технологической оснастки наукоемких производственных процессов.

Алгоритм мониторинга состояния оснастки

Технологический процесс производства изделий наукоемкой продукции состоит из ряда операций, между которыми в процессе функционирования происходит обмен знаниями:

ТО₁ – проектирование 2D-модели изделия;

ТО₂ – проектирование 2D-модели оснастки;

ТО₃ – изготовление оснастки;

ТО₄ – контроль геометрии оснастки с помощью шаблонов и измерительного оборудования;

ТО₅ – слесарная доработка оснастки в случае несоответствия геометрии установленным требованиям;

ТО₆ – изготовление изделия;

ТО₇ – контроль геометрии изделия.

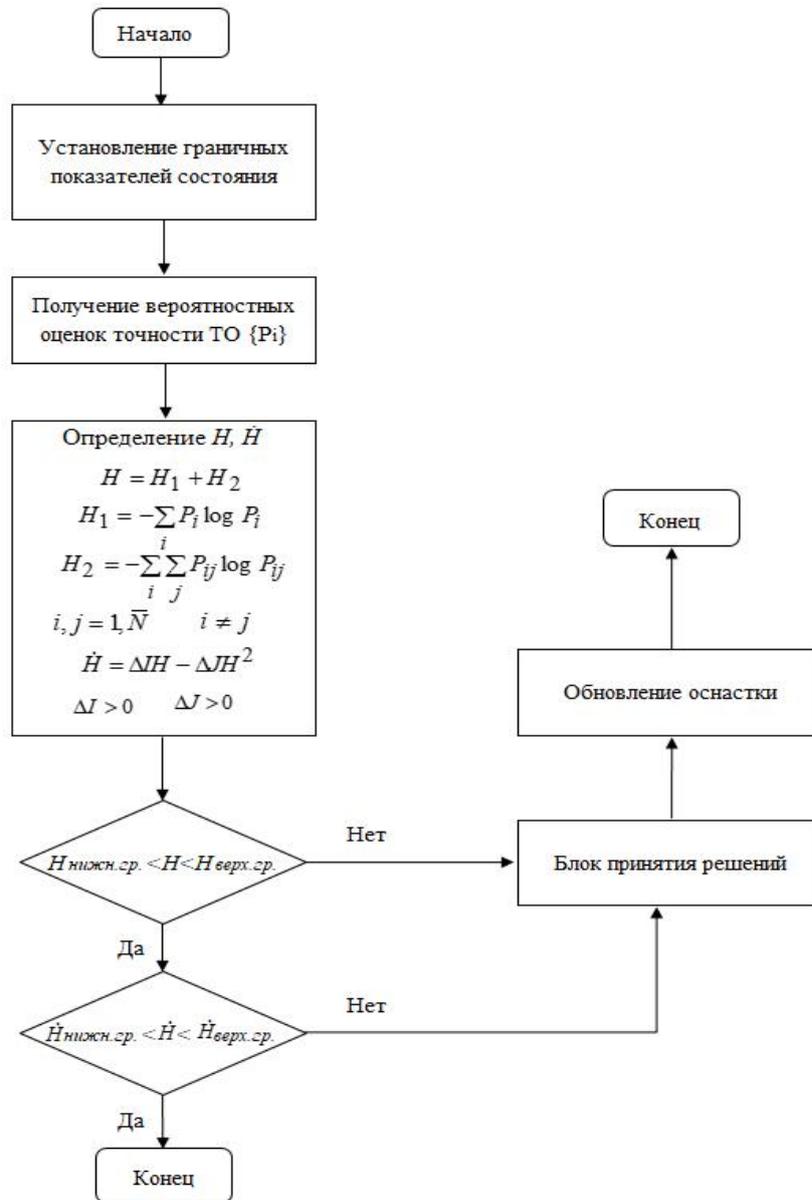


Рис. 1. Структурная схема алгоритма оценки состояния оснастки

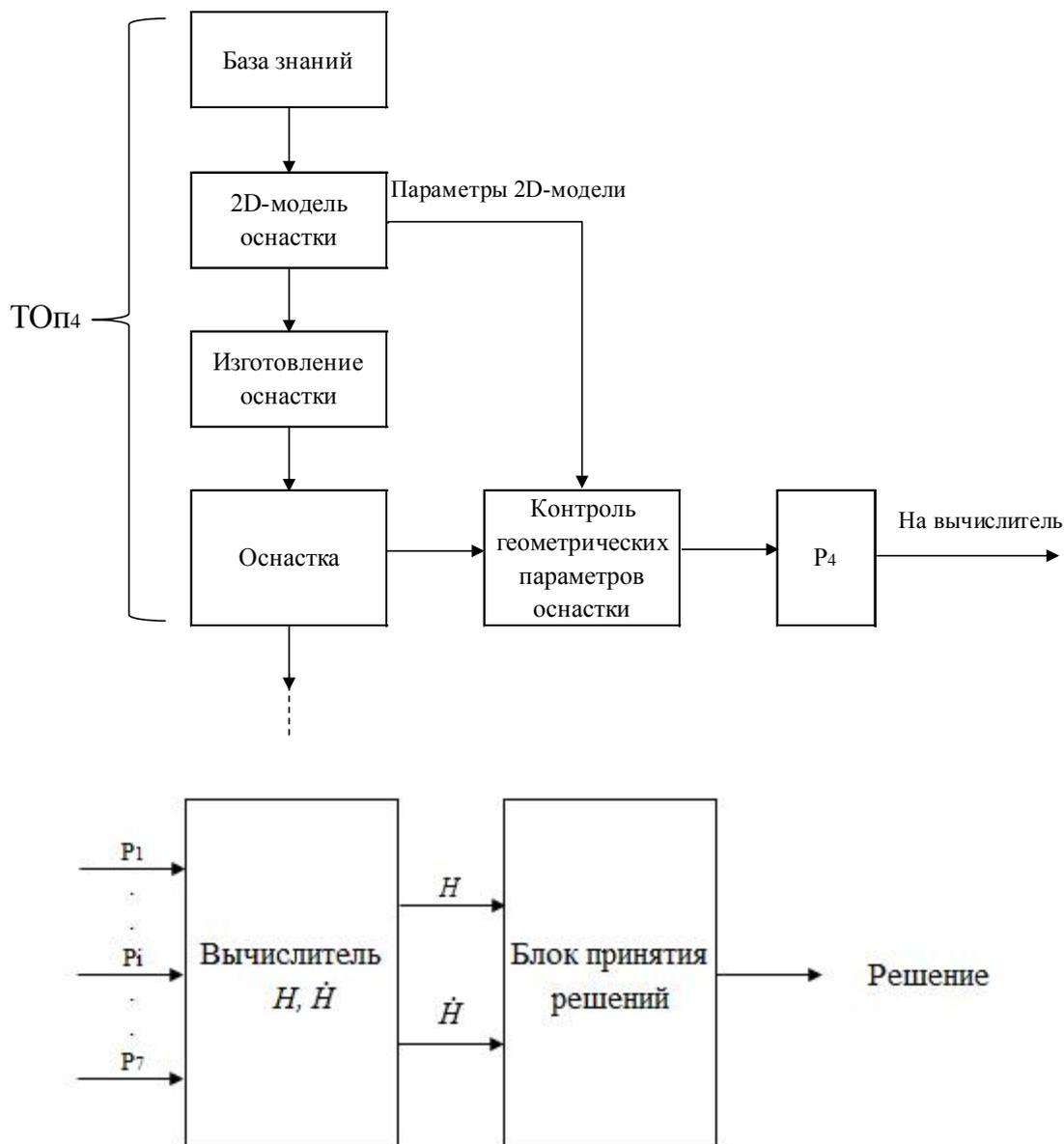


Рис. 2. Структурная схема системы мониторинга

Алгоритм (рис. 1) включает установление граничных показателей состояния оснастки, определение текущих значений оценок точности технологических операций $\{P\}$ и соответствующих показателей состояния (H и \dot{H}). В случае выхода показателей за установленные границы принимается решение об обновлении технологической оснастки (рис. 1)

Система мониторинга

Система мониторинга (рис. 2) позволяет определять вероятностные показатели точности технологических операций P_i , которые далее поступают на вычислитель и блок принятия решений, которые функционируют в соответствии с алгоритмом (рис. 1)

Реальные значения показателей состояния технологической оснастки служат основанием для принятия решения о необходимости ее обновления (рис. 3). Как показала практическая апробация предлагаемой системы мониторинга возможно снижение себестоимости оснастки для изготовления лопаток ГТД на 15% за счет увеличения ее срока службы.

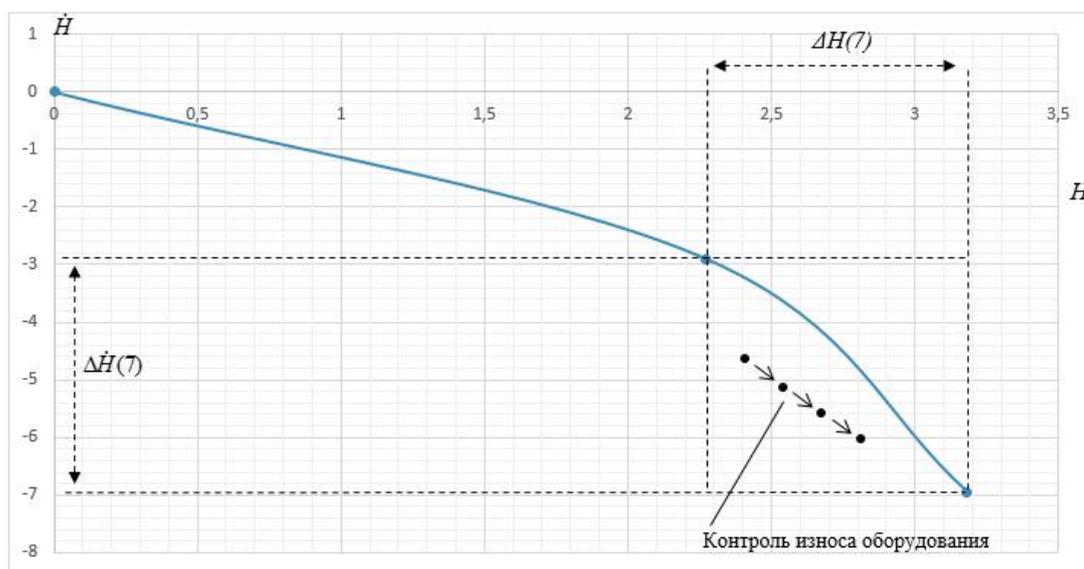


Рис. 3. Контроль состояния оснастки технологического процесса

Выводы

Предложенные принципы структурного построения системы могут быть использованы при создании экспертных систем, предназначенных для контроля и прогнозирования развития научных направлений по статистическим показателям информационного потока.

Список литературы

Анцыферов С.С., Фазилова К.Н. Метод контроля функционирования когнитивных систем в режиме неравновесной устойчивости // Моделирование неравновесных систем: Материалы XXIII Всероссийского семинара, 4–6 октября 2020 г., Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук. 2020. С. 3–6.

Анцыферов С.С., Фазилова К.Н. Алгоритмы контроля функционирования неравновесных систем обработки информации // Моделирование неравновесных, адаптивных и управляемых систем: Материалы XXIV Всероссийского семинара, 1–3 октября 2021 г., Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук. 2021. С. 12–17.

РАСЧЕТ ИЗМЕНЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ПОВЕРХНОСТНОЙ ОБЛАСТИ *n-p* ПЕРЕХОДА НА ОСНОВЕ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА

Н.М. Богатов, В.С. Володин, Л.Р. Григорьян, М.С. Коваленко

Кубанский государственный университет, bogatov@phys.kubsu.ru

Теория полупроводниковых приборов с *n-p*-переходами, построенная Шокли [1], непрерывно совершенствуется. Популярность получили модели, описывающие два предельных случая: резкий *n-p*-переход, плавный *n-p*-переход с линейным распределением примесей [2, 3]. Для анализа *n-p*-переходов с реальным профилем примесей разработаны численные модели [4, 5].

Ключевым положением теории является изменение потенциала электрического поля в области пространственного заряда (ОПЗ) *n-p*-перехода. Учет изменения концентрации носителей заряда в ОПЗ позволяет более точно рассчитать распределение электрического потенциала и плотности заряда [6]. В случае сильно несимметричных, а также сверхмелких *n-p*-переходов используются численные расчеты [7, 8].

Правильное описание *n-p*-перехода необходимо для решения прикладных задач и определения параметров области объемного заряда реальных полупроводниковых структур. В работах [6, 9] с помощью численного моделирования показано, что в резком или мелком диффузионном, несимметричном *n-p*-переходе присутствуют 3 области: 1 – эмиттер, содержащий плотность положительного заряда меньшую, чем концентрация ионизированных доноров; 2 – область, обогащенная электронами, в которой концентрация электронов превышает концентрацию ионизированных примесей; 3 – область, обедненная электронами и дырками, содержащая плотность отрицательного заряда, созданного ионизированными акцепторами.

Цель работы – рассчитать плотность заряженных частиц в диффузионном несимметричном *n-p*-переходе с учетом поверхностных состояний, используя численное решение уравнения Пуассона.

Общепринятая условная схема планарного *n-p*-перехода показана на рис.1:

эмиттер расположен при $-w_n \leq x < -d_n$, область, обедненная носителями заряда, (ООНЗ) расположена при $-d_n \leq x \leq d_p$, база, в которой выполняется условие локальной нейтральности, расположена при $d_p \leq x \leq w_p$. Концентрация ионизованных примесей при $-w_n \leq x \leq w_p$ задается формулой (1):

$$N(x) = N_D(x) - N_A, \quad (1)$$

где концентрация ионизованных доноров в модели диффузии из неограниченного источника

$$N_D(x) = N_{D0} \operatorname{erfc}\left(\frac{(x + w_n)}{x_0}\right),$$

концентрация ионизованных акцепторов

$$N_A = \text{const}.$$

При $x = 0$ выполняется условие $N(0) = 0$ – металлургическая граница n - p -перехода. В расчетах использованы следующие значения: $N_{D0} = 10^{26} \text{ м}^{-3}$, $N_A = 10^{21} \text{ м}^{-3}$. Глубина залегания n - p -перехода $w_n = 0,45 \cdot 10^{-6} \text{ м}$ достаточно велика, чтобы уменьшить эффект образования области, обогащенной электронами, в ОПЗ.

Концентрации электронов $n(x)$, дырок $p(x)$ определяются по формулам [2]:

$$n(x) = N_c e^{\frac{F - E_g + q\varphi(x)}{kT}}, \quad p(x) = N_v e^{\frac{-F - q\varphi(x)}{kT}}, \quad (2)$$

где N_c – эффективная плотность электронных состояний в окрестности дна зоны проводимости, F – электрохимический потенциал (уровень Ферми), отсчитанный от вершины валентной зоны в точке $x = w_p$, q – элементарный заряд, $\varphi(x)$ – потенциал внутреннего электрического поля, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, N_v – эффективная плотность электронных состояний в окрестности вершины валентной зоны, E_g – ширина запрещенной зоны.

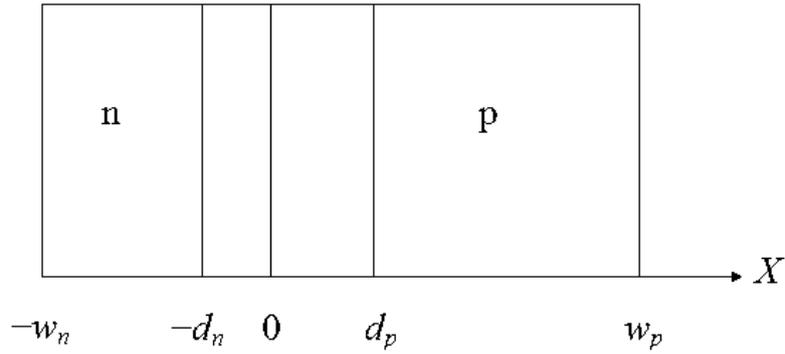


Рис.1. Схема *n-p*-перехода.

Потенциал внутреннего электрического поля является решением уравнения Пуассона [2]:

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = -\frac{q}{\varepsilon \varepsilon_0} (p(x) - n(x) + N^{ion}(x)), \quad (3)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость вещества, ε_0 – диэлектрическая постоянная, N^{ion} – концентрация ионизованных примесей и дефектов в объеме и поверхностной области.

Дополнительным условием для уравнения (3) является условие общей электронейтральности [2]:

$$\int_{-w_n}^{w_p} (p(x) - n(x) + N^{ion}(x)) dx = 0. \quad (4)$$

В общем случае концентрация заряженных частиц $\rho(x) = p(x) - n(x) + N^{ion}(x)$ распределена по всей длине полупроводника $-w_n \leq x \leq w_p$, так что параметры d_n , d_p не входят в уравнения явно.

Часто используемым предположением является отсутствие плотности заряда на внешних поверхностях

$$\rho(-w_n) = 0, \quad \rho(w_p) = 0. \quad (5)$$

Условия (5) и формулы (2) используются для определения значений $\varphi(-w_n)$ и $\varphi(w_p)$, являющихся крайевыми условиями для решения уравнения (3). Из условия (4) следует, что

$$\left. \frac{d}{dx} \varphi(x) \right|_{x=-w_n} = \left. \frac{d}{dx} \varphi(x) \right|_{x=w_p} = 0. \quad (6)$$

Сравнивая n - p -переход с моделью плоскопараллельного конденсатора, отметим, что напряженность электрического поля $E(x) = -\frac{d}{dx} \varphi(x)$ равна нулю вне конденсатора, тогда условие (6) следует записать в виде

$$\left. \frac{d}{dx} \varphi(x) \right|_{x=-w_n-o} = \left. \frac{d}{dx} \varphi(x) \right|_{x=w_p+o} = 0, \quad (7)$$

где o – произвольное смещение. Используем этот факт для построения численного решения уравнения Пуассона в n - p -переходе.

Выбор начала отсчета потенциала произволен, поэтому считаем, что $\varphi(w_p) = 0$. Размер базы $w_p \gg \max(w_n, d_p)$, база локально нейтральна, поэтому $\rho(w_p) = 0$. Отсюда, используя формулы (2), находим значение F .

Из (7) следует, что $\varphi(x) = \varphi_0$ при $x \leq -w_n$. Константа φ_0 явно не задается, а определяется в итерационном процессе при достижении условия (4). Уравнение Пуассона в разностной форме (8) решалось методом последовательных приближений.

$$\frac{\varphi^j(x-h) - 2\varphi^j(x) + \varphi^{j-1}(x+h)}{h^2} = -\frac{q}{\varepsilon\varepsilon_0} \left(N_v e^{\frac{-F-q\varphi^j(x)}{kT}} - N_c e^{\frac{F-E_g+q\varphi^j(x)}{kT}} + N^{ion}(x) \right). \quad (8)$$

Краевые условия $\varphi^j(-w_n-h) = \varphi^j(-w_n)$, $\varphi^j(w_p) = 0$. В формуле (8) h – шаг дискретизации, j – номер итерации. Начальное приближение $\varphi^0(x)$ является решением уравнения локальной нейтральности

$$N_v e^{\frac{-F-q\varphi^0(x)}{kT}} - N_c e^{\frac{F-E_g+q\varphi^0(x)}{kT}} + N^{ion}(x) = 0.$$

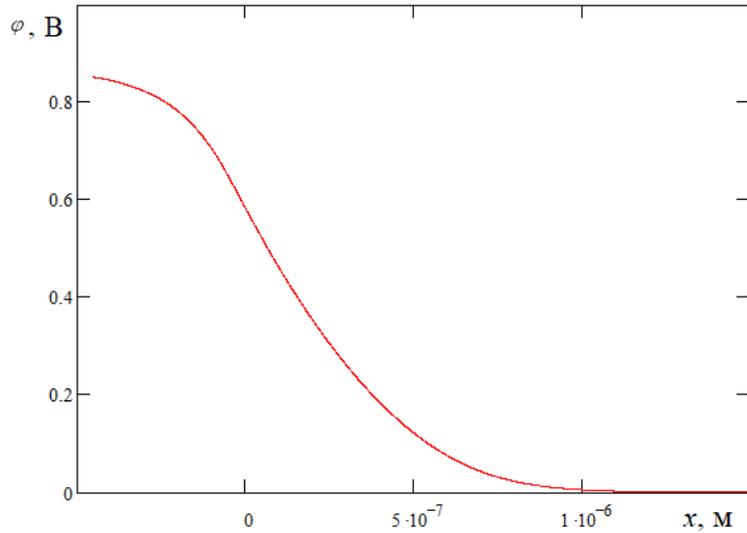


Рис.2. Рассчитанная зависимость $\varphi(x)$.

Значения $\varphi^j(x)$ находим, решая алгебраические уравнения (8) во всех точках отрезка дискретизации от $x = -w_n$ до $x = w_p - h$, используя $\varphi^{j-1}(x)$. Итерационный процесс прекращается при достижении условия (4).

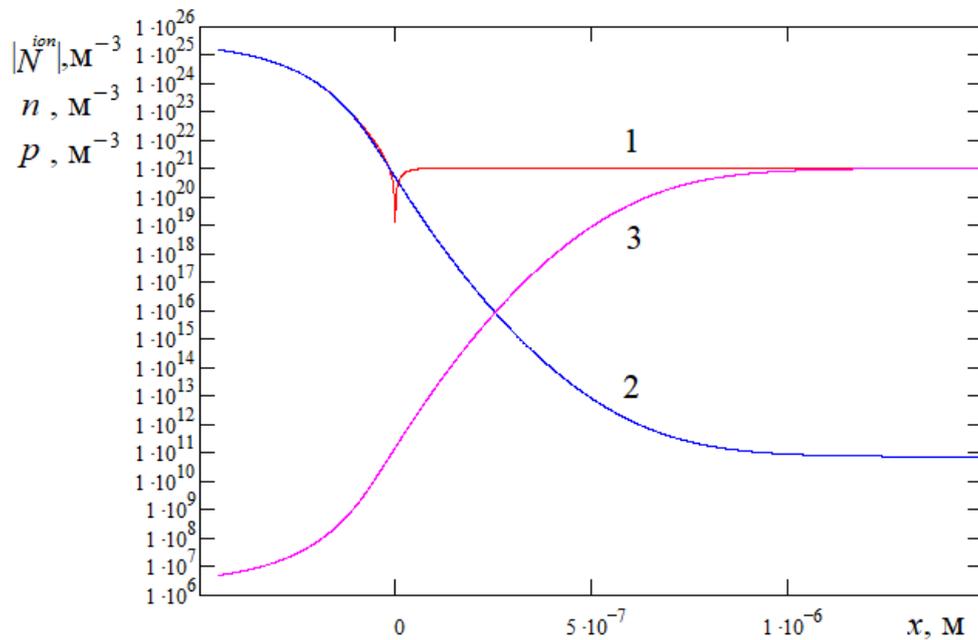


Рис.3. Концентрации 1 – ионизованных примесей (по модулю) $|N^{ion}(x)|$,
2 – электронов $n(x)$, 3 – дырок $p(x)$.

Численное решение без учета поверхностных состояний получено в [10].
 Рассчитанное распределение электрического потенциала $\varphi(x)$ показано на рис.2.

Функция $\varphi(x)$ использована для расчета концентраций электронов $n(x)$, дырок $p(x)$ (рис.3) и заряженных частиц $\rho(x)$ (рис.4).

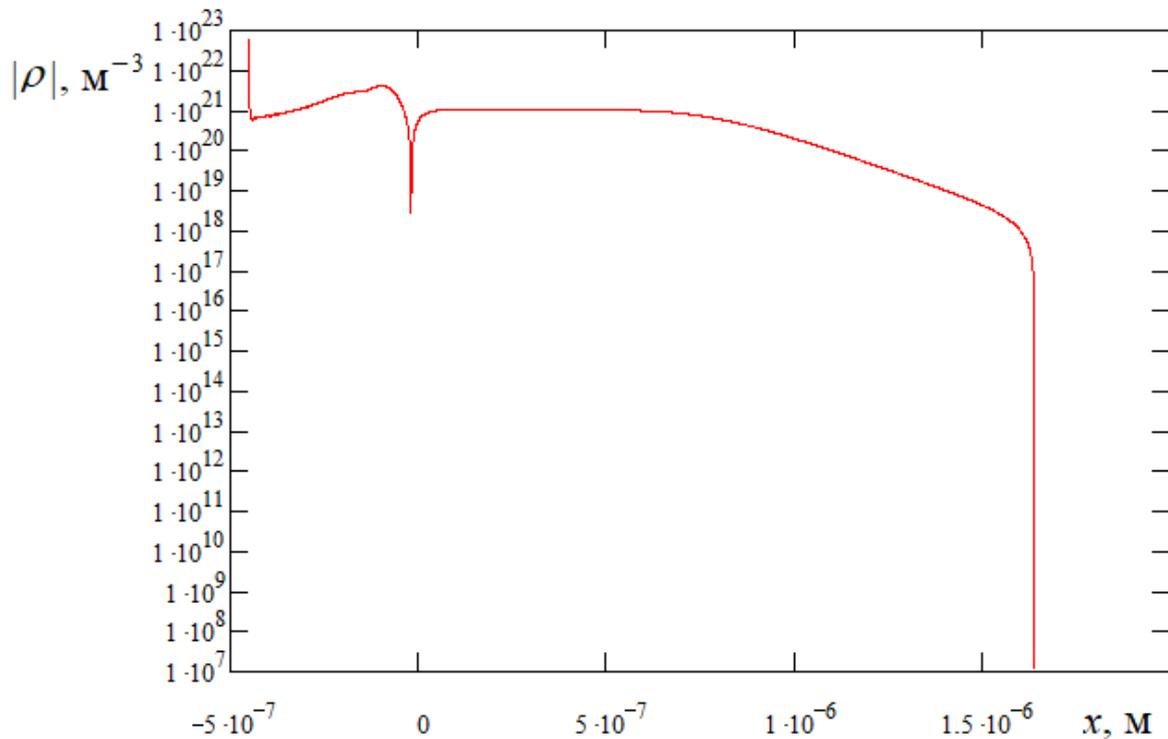


Рис.4. Модуль концентрации заряженных частиц $|\rho(x)|$.

Сравнение зависимостей на рис.3 показывает, что ООЗ расположена при $0 < x < 0,75 \cdot 10^{-6}$ м, где $n(x)$, $p(x) \ll |N^{ion}(x)|$. Часть ОПЗ, содержащая положительную плотность заряда, начинается на поверхности $x = -w_n$ и простирается вплоть до металлургической границы $x = 0$ (рис.4).

Существенной особенностью полученных зависимостей является наличие плотности заряда на поверхности $x = -w_n$. Этот эффект не связан с поверхностными состояниями, лежащими в зоне запрещенных энергий, отсутствующими в данном расчете. Причиной является изменение концентрации ионизованных доноров в эмиттере.

Введём плотность поверхностных состояний. В эмиттере n -типа

поверхностные состояния в запрещенной зоне, расположенные ниже уровня Ферми, заряжены отрицательно $N_{surf} < 0$. В эмиттере p -типа $N_{surf} > 0$. Влияние напряженности электрического поля, обусловленного поверхностными состояниями, на скорость поверхностной рекомбинации рассмотрено в [11].

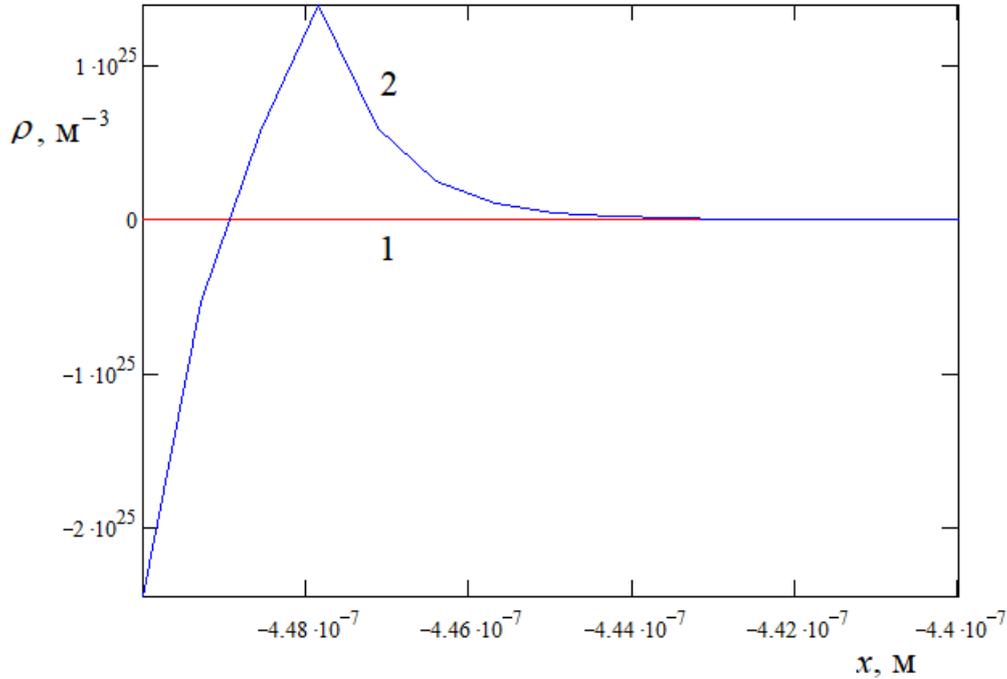


Рис.5. Концентрация заряженных частиц $\rho(x)$ в поверхностной области

$$1 - N_{ss} = 0, 2 - |N_{ss}| = 10^{17} \text{ м}^{-2}.$$

Плотность заряженных состояний в поверхностной области зададим в виде функции

$$N_s(x) = \begin{cases} N_{surf} \frac{w_{surf} - w_n - x}{w_{surf}}, & \text{при } -w_n \leq x < (w_{surf} - w_n) \\ 0, & \text{при } (w_{surf} - w_n) \leq x \leq w_p \end{cases}, \quad (9)$$

где w_{surf} – толщина поверхностного слоя. В расчетах использованы следующие значения параметров формулы (9) $|N_{surf}| = 10^{26} \text{ м}^{-3}$ $w_{surf} = 2 \cdot 10^{-9} \text{ м}$, так что плотность поверхностных состояний $|N_{ss}| = 10^{17} \text{ м}^{-2}$,

$$N_{ss} = \int_{-w_n}^0 N_s(x) dx = \frac{1}{2} N_{surf} w_{surf}.$$

В уравнении (3) функция $N^{ion}(x)$ включает зависимость $N_s(x)$. Рассчитаны

$\varphi(x)$, $n(x)$, $p(x)$, $\rho(x)$. На рис. 5 продемонстрировано влияние поверхностного заряда в эмиттере n -типа на изменение концентрации заряженных частиц $\rho(x)$ в поверхностной области n - p перехода.

В поверхностной области значения $|\rho(x)|$ при $N_{ss} = 0$ (рис. 4) много меньше, чем при $|N_{ss}| = 10^{17} \text{ м}^{-2}$ (рис. 5), поэтому в масштабе рис. 5 первая зависимость отображается прямой линией. В рассмотренном случае отрицательный заряд поверхностных дефектов экранируется положительным зарядом ионизованных доноров, так как $n(x) < N^{ion}(x)$ за пределами поверхностного слоя. Поэтому на зависимости 2 рис. 5 присутствует максимум.

Неосновные носители заряда дырки перемещаются в направлении силовых линий напряженности электрического поля (от плюса к минусу), созданного плотностью поверхностного заряда, к поверхности, где рекомбинируют. Таким образом, поверхностные состояния существенно влияют на транспорт носителей заряда в эмиттере.

Список литературы

1. Shockley W. The theory of n - p junctions in semiconductors and n - p junction transistors / W. Shockley // Bell Syst. Tech. J. — 1949. — V.28. — N 7. P. 435 – 439.
2. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. Кн. 1 / С. Зи. — М.: Мир, 1984. — 456 с.
3. Pulfrey D.L. Understanding Modern Transistors and Diodes / D.L. Pulfrey. — Cambridge University Press, 2010. — 335 p.
4. Redfield D. Revised model of asymmetric n - p junctions / D. Redfield // Applied Physics Letters. — 1979. — V.35. — July 15. P. 182 – 184.
5. Pfitzner A. Numerical solution of the one - dimensional phenomenological transport equation set in semiconductors / A. Pfitzner // Electron Technology. — 1977. — V.10. — N 4. P. 3 – 21.
6. Богатов Н.М. Моделирование распределения заряда в несимметричном n - p -переходе / Н.М. Богатов // Моделирование неравновесных систем: Материалы

- XIX Всероссийского семинара, 7 – 9 октября 2016 г. Красноярск. Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН. — 2016. С. 10 – 14.
7. Богатов Н.М. Анализ влияния легирующих примесей на эффективность солнечных элементов из монокристаллического кремния / Н.М. Богатов // Электронная техника. Сер. 6. Материалы. — 1991. — В. 6(260). С. 48 – 53.
 8. Богатов Н.М. Анализ влияния рекомбинации в области пространственного заряда на вольт-амперную характеристику кремниевых солнечных элементов / Н.М. Богатов // Гелиотехника. — 1990. — № 6. С. 49 – 53.
 9. Bogatov N.M. Modelling of asymmetric *n-p* junction enriched with charge carriers in equilibrium state / N.M. Bogatov, L.R. Grigoryan, A.I. Kovalenko, I.I. Nesterenko, Y.A. Polovodov // IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series. — 2019. — V. 1278. — I. 012006. P. 1 – 7.
 10. Богатов Н.М. К выбору краевых условий для численного решения уравнения Пуассона в полупроводниковом *n-p*-переходе / Н.М. Богатов // Моделирование неравновесных, адаптивных и управляемых систем: Материалы XXVI Всероссийского семинара, 6 октября 2023 г. Красноярск. Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН. — 2023. — С. 8 – 14.
 11. Богатов Н.М. Влияние поверхностных состояний на электрическое поле *n-p* перехода / Н.М. Богатов, В.С. Володин, Л.Р. Григорьян, М.С. Коваленко // Известия ЮФУ. — Технические науки. — 2024. — № 3. — С. 266 – 275.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ПРОЦЕССА ОБЪЕДИНЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ Au И Ag¹

С.Л. Гафнер¹, А.А. Череповская

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова,

¹*sgafner@rambler.ru*

1. Введение

Размер и форма наночастиц (НЧ), а также расстояние между ними имеют большое влияние на их свойства. Коалесценция является одним из основных процессов, которые отвечают за изменение данных геометрических параметров массива наночастиц. Более подробное изучение данного процесса позволит в дальнейшем повысить точность контроля и управления геометрическими характеристиками массивов металлических наночастиц.

В последние годы различными научными группами продемонстрированы результаты исследований процесса коалесценции массивов металлических наночастиц на твердотельной подложке под действием электронного луча. Стоит отметить, что в данных работах процесс объединения наночастиц объясняется различными механизмами. Например, в работе [1] показано объединение наночастиц Au, которое достигается за счёт энергетического воздействия потока электронов, малого расстояния между частицами, а также наличием на поверхности подложки атомарного слоя золота, являющегося катализатором «прыжкообразной коалесценции». В работе [2] показано, что слияние наночастиц обусловлено перемещением атомов от частицы к частице, возникновением атомных цепочек с последующим образованием «мостика» для материального обмена. В то же время в работе [3] привели объяснение, что слияние наночастиц может протекать за счёт образования не материальных, а энергетических связей, возникающих из-за образования плазмонов, индуцированных потоком электронов (плазмонное притяжение).

¹Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №23-12-20003, <https://rscf.ru/project/23-12-20003/> при паритетной финансовой поддержке Правительства Республики Хакасия

Таким образом, нет однозначного описания работы механизма коалесценции наночастиц золота на твердой поверхности. Кроме того, важно понимать, что коалесценция частиц зависит от свойств материала наночастиц, чему не уделяется внимания в приведённых работах. Целью нашей работы стало изучение и сравнение поведения массивов наночастиц золота и серебра со схожими геометрическими параметрами, в которых имеет место процесс коалесценции.

2. Компьютерная модель

Для имитации процесса коалесценции был использован метод молекулярной динамики (МД), позволяющий на атомном уровне достаточно подробно рассмотреть возможные механизмы такого объединения. Для описания межатомного взаимодействия был применен модифицированный потенциал сильной связи TB-SMA [4]. В качестве исходных объектов использовались наборы Au и Ag наночастиц различного диаметра и находящиеся на разных расстояниях R друг от друга ($R = 0.5 - 1.5$ nm). Параметры моделирования были подобраны так, что бы максимально точно имитировать результаты электронно-микроскопических исследований.

Для моделирования процессов термического воздействия была использована компьютерная программа MDNTP, разработанная Dr. Ralf Meyer, University Duisburg Germany. Температура была определена с использованием средней кинетической энергии атомов, рассчитанной на основе скоростного алгоритма Верле с шагом по времени $h = 1$ фс. Структурные переходы были идентифицированы с помощью визуализаторов xmakemol и OVITO. Все кластеры при температуре $T = 100$ K подвергались обязательной процедуре термической релаксации для оптимизации их внутренней структуры и формы.

3. Анализ полученных результатов

На первом этапе моделировалась ситуация нахождения AuНЧ на не нагретой подложке и без воздействия потока высокоэнергетических электронов, характерных для работы ТЭМ. Таким образом, модельная система находилась

при комнатной температуре $T = 300$ К в состоянии примерного термодинамического равновесия (канонический NPT ансамбль). Для более точного определения всех возможных атомных перемещений под действием температурного фактора использовался временной шаг в 1.0 фс, а весь диапазон моделирования ограничивался $t = 200$ нс.

В качестве наиболее характерного и наглядного примера из всего набора модельных AuНЧ приведем данные для AuНЧ диаметром $D = 6.0$ нм и $D = 3.0$ нм с исходным идеальным ГЦК строением. Из рисунка 1 видно, что объединение данных наночастиц происходит по механизму «прыжок». То есть, до времени примерно $t = 160$ нс кластеры плавно сближаются друг с другом (начальное расстояние между ними составляло 1.5 нм), а затем происходит очень быстрое их слияние в течение буквально нескольких наносекунд.

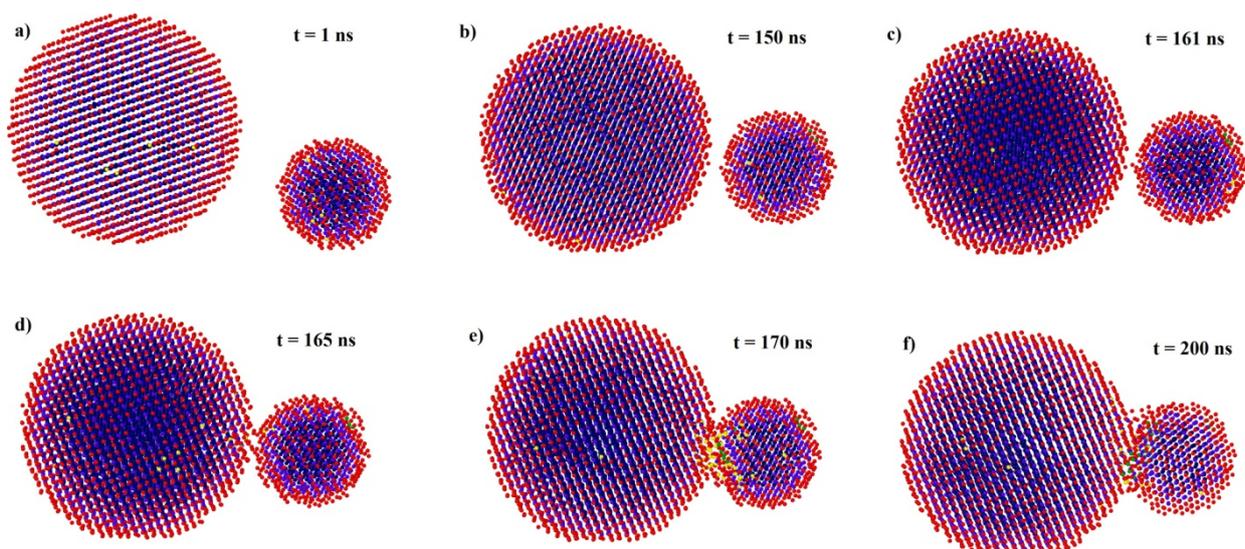


Рисунок 1. Мгновенные фотографии процесса слияния наночастиц Au диаметром 6.0 нм и 3.0 нм через «прыжок» при $T = 300$ К. МД моделирование.

На рис. 1d хорошо видно, что при этом малый кластер золота фактически встраивается в атомные плоскости большого Au кластера. То есть для того чтобы коалесценция AuНЧ происходила по механизму «прыжок» необходимо согласование кристаллографических плоскостей обоих НЧ, что может быть, в частности, достигнуто небольшим вращением одного из кластеров, замеченным в [5]. Такой вид объединения получил в литературе название «механизм роста

ориентированным прикреплением» [2]. Отметим, что при выбранной температуре ($T = 300$ К) диффузионные процессы являются достаточно подавленными и времени $t = 200$ нс оказывается недостаточным для объединения исходных AuНЧ в единый кластер.

Далее попробуем учесть воздействие потока высокоэнергетических электронов, возникающего при работе ТЭМ. В действительности при бомбардировке наночастиц такими электронами происходит локальное выделение энергии, которое аналогично подводу к наночастице энергии термического характера kT . Поэтому для учета этого воздействия в первом приближении будет достаточно просто увеличить температуру модельной системы. Исходя из этого предположения было проанализировано поведение модельной системы при $T = 500; 600; 800$ и 900 К и было найдено, что при всех этих температурах наблюдалась коалесценция AuНЧ через механизм, условно называемый «мостик». При $T = 500$ К были зафиксированы лишь зачатки такого вида объединения AuНЧ, однако с ростом температуры данный механизм становился все более отчетливой и при $T = 800$ К он уже наблюдался в полном объеме (рис. 2). Экспериментальная работа [2] подтверждает возможность образования такого «мостика» при объединении AuНЧ диаметрами $D = 5$ нм и $D = 11$ нм уже при температуре прогрева подложки до 200 °С и дозе облучения электронами $14063 \text{ e} \text{ \AA}^{-2} \text{ s}^{-1}$, что согласуется и с нашими оценками.

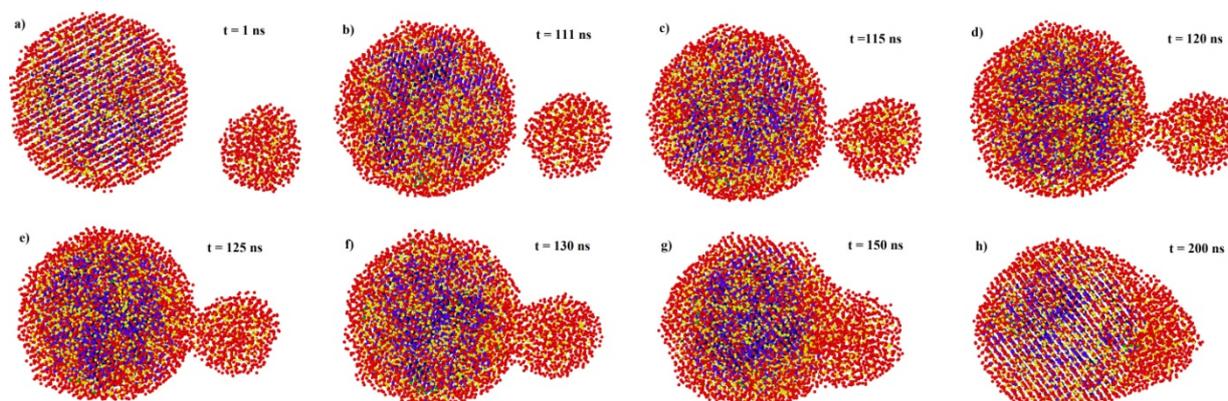


Рисунок 2. Мгновенные фотографии процесса слияния наночастиц Au диаметром 6.0 нм и 3.0 нм через «мостик» при $T = 800$ К. МД моделирование.

Проведенное нами компьютерное моделирование по коалесценции

серебряных наночастиц показало отличие в этом процессе от объединения AuНЧ. Так как используемый нами потенциал межатомного взаимодействия [4] тестировался по характеристикам объемного серебра, находящегося в кристаллическом состоянии, то имитация процесса испарения AgНЧ оказалась технически невозможной, можно было только фиксировать изменения происходящие в кристаллической или аморфном (расплав) состояниях. Тем не менее полученных данных по коалесценции AgНЧ в равновесных условиях (NVT канонический ансамбль), подразумевающих неизменное количество атомов в модельных кластерах и их объем, оказалось достаточно для того что бы сделать некоторые выводы.

Во-первых, «механизм роста ориентированным прикреплением» в случае AgНЧ не наблюдается, в момент объединения AgНЧ направления их атомных плоскостей очень сильно различаются.

Во-вторых, ещё одним существенным отличием в коалесценции AgНЧ от аналогичного процесса в AuНЧ было практически полное отсутствие объединения AgНЧ по механизму «мостик». Такой способ слияния AgНЧ не наблюдался нами даже при максимальной температуре модели $T = 900$ К. Еще раз отметим, что все полученные при МД моделировании результаты были получены при условии термодинамического равновесия.

4. Заключение

Таким образом, результаты проведенного моделирования свидетельствуют о том, что коалесценция наночастиц золота происходит в основном по механизму «мостик» и только при очень низком уровне термической энергии объединение наблюдается в виде «скачка» Причина такого поведения AuНЧ является достаточно очевидной: золото является мягким и пластичным материалом и его наночастицы обладают относительно невысокой температурой плавления [6], тогда как коалесценция наночастиц серебра проходит в подавляющем большинстве случаев по механизму «прыжок».

Список литературы

1. Wan N. A 'jump-to-coalescence' mechanism during nanoparticle growth revealed by in situ aberration-corrected transmission electron microscopy observations / N. Wan, L. Shuang-ying, X. Jun, M. Martini – *Nanotechnology*. – 2016. – № 27. Art. no. 205605. – 8 pp.

2. Shengnan Y. In Situ TEM Observation of the Atomic Transport Process during the Coalescence of Au Nanoparticles / Y. Shengnan, Y. Wenjuan, D. Ziliang, X. Wei, S. Yongli. – *Nano Letters*. – 2023. – № 22(20). P. 8115–8121

3. Scholl J.A. Observation of Quantum Tunneling between Two Plasmonic Nanoparticles / J. A. Scholl, A. García-Etxarri, A. L. Koh, J. A. Dionne. – *Nano Letters*. – 2013. – №13. P. 564–569

4. Rapallo A. Global optimization of bimetallic cluster structures. I. Size-mismatched Ag-Cu, Ag-Ni, and Au-Cu systems / A. Rapallo, G. Rossi, R. Ferrando, A. Fortunelli [et al.] / *The J. of Chem. Phys.* – 2005. – № 122(19). – Art.No. 194308. – 14 p.3.

5. Esparza R. Coalescence of Au nanoparticles: an in-situ Cs-corrected stem study at low voltage / R. Esparza, C. Gutiérrez-Wing, R. Pérez, M. José-Yacamán. – *Acta Microscopica*. – V. 28. – № 2. P. 48-57.

6. Gafner Yu. Dual structural transition in small nanoparticles of Cu-Au alloy / Yu. Gafner, S. Gafner, L. Redel, I. Zamulin // *Journal of Nanoparticle Research*. – 2018. – V. 20. – № 2. – Art. no 51.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СОХРАНЕНИЯ СОКРАТИТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ СЕРДЦА У ПАЦИЕНТОВ ПОСЛЕ ПЕРЕНЕСЕННОГО ИНФАРКТА МИОКАРДА

С.Е.Головенкин

Красноярский Государственный медицинский университет,
кафедра факультетской терапии, gse2008@mail.ru

Важнейшей задачей при лечении острого инфаркта миокарда (ОИМ) является сохранение сократительной способности миокарда. На её решение направлены все современные методы лечения и реабилитации пациентов с этой тяжелой патологией. Поскольку больные ОИМ проходят лечение [1,2] и курс реабилитации [3, 4] в соответствии с национальными рекомендациями и стандартами оказания помощи этой категории больных, одним из путей повышения эффективности лечения может стать дополнительный учет индивидуальных особенностей пациента. Во многом индивидуальный подход к лечению и реабилитации пациента может быть осуществлен благодаря наличию информации о генетических особенностях пациента. В последние годы в отечественной литературе были опубликованы результаты исследований, подтверждающие влияние особенностей генетики пациента на течение ишемической болезни сердца (ИБС). Доказана связь некоторых генотипов с увеличением риска развития ОИМ, у больных ИБС [5,6], выявлены тенденции влияния ряда генотипов на ремоделирование миокарда [7], получена первая информация по выявлению генетических маркеров фиброза миокарда [8], что в случае успешного завершения исследования могло бы стать основой для разработки таргетной терапии у этих пациентов [9,10]. В научных исследованиях зарубежных коллег, посвященных изучению влияния генетических особенностей на восстановление сократительной способности миокарда, можно выделить следующие направления:

1. Влияние генетических особенностей на систолическую функцию левого желудочка (ЛЖ) после перенесенного ИМ (в т.ч. фракцию выброса),

2. Влияние генетических особенностей на диастолическую функцию левого желудочка после перенесенного ИМ,
3. Влияние генетических особенностей на усвоение кислорода миокардом,
4. Влияние генетических особенностей на адаптацию к различным уровням физической нагрузки («физическая выносливость»),
5. Влияние генетических особенностей на развитие сердечной недостаточности (СН) после перенесенного ИМ в зависимости от гендерных особенностей (т.е. в зависимости от пола пациента).

В рамках изучения первого направления научных исследований важным моментом является определение уровня гомоцистеина в сыворотке крови. Уровни гомоцистеина связаны с сердечной недостаточностью в больших проспективных эпидемиологических исследованиях [11,12,13]. Причинная роль гомоцистеина в сердечной дисфункции подтверждается экспериментальными исследованиями на животных и *in vitro* [14]. Полиморфизм С677Т гена МТНFR является известным генетическим модулятором уровня гомоцистеина. Носительство гомозиготного генотипа Т677Т гена МТНFR является независимым долгосрочным предиктором сердечной смерти у пациентов с преждевременным ИМ с подъёмом сегмента ST [15]. Исходя из этих данных, возможно, будет полезной оценка уровня гомоцистеина у пациентов после ИМ с последующим подбором терапии, направленной на его снижение: витамин В6, фолиевая кислота, витамин В12, диета с ограничением метионина и т.д. Но эта гипотеза требует проверки в соответствующих клинических исследованиях. СН после ИМ - бесспорно сложная многогранная проблема. Эффективность профилактики развития СН зависит, в том числе, и от препаратов, назначаемых пациентам, в частности для стабилизации уровня артериального давления (АД). Так периндоприл является ингибитором ангиотензинпревращающего фермента (ACE), который часто используется для лечения пациентов с острым инфарктом миокарда (ОИМ). Однако недостаточно известно о влиянии полиморфизмов гена ACE на эффективность периндоприла при ОИМ или прогноз у пациентов с ОИМ. Поэтому был проведён анализ ассоциаций полиморфизмов rs121912703,

rs767880620 и rs397514689 гена *ACE* с прогнозом у больных ОИМ и клинической эффективностью периндоприла в лечении ОИМ. На фоне применения периндоприла улучшение ремоделирования желудочков у пациентов с ОИМ с полиморфизмом гена *ACE*, с частыми аллелями было лучше, чем у пациентов с минорными аллелями rs121912703, rs767880620 и rs397514689 гена *ACE*. Пациенты с частыми аллелями имели более низкое систолическое и диастолическое артериальное давление, чем пациенты с минорными аллелями ($p < 0,01$). Содержание сывороточного *ACE* и ангиотензина II у пациентов с ОИМ, несущих частые аллели *ACE*, было ниже, чем у пациентов, несущих любой из минорных вариантов аллелей ($p < 0,01$). Трехлетняя выживаемость больных ОИМ, несущих частые аллели *ACE*, была значительно выше по сравнению с больными ОИМ, несущими минорные аллели ($p < 0,01$) [16].

SCN5A кодирует потенциал-зависимый Na^+ канал $NaV1.5$, который отвечает за деполяризацию сердечного потенциала действия и межклеточную проводимость. Мутации, нарушающие кодирующую последовательность *SCN5A*, вызывают наследственные аритмии и кардиомиопатии, а однонуклеотидные полиморфизмы (SNP) ассоциированы с внезапной сердечной смертью, с сердечной недостаточностью. [17-19]. Однако клиническое значение этих полиморфизмов остается недостаточно изученным. В недавнем исследовании был идентифицирован ОНП влияющий на экспрессию гена *SCN5A* в сердце человека rs1805126. Ранее было показано, что этот SNP воспроизводимо ассоциируется с электрофизиологическими параметрами сердца, но он не рассматривался как причинный. Авторам удалось показать, что miR-24 сильно подавляет экспрессию *SCN5A* и что rs1805126 модулирует эту регуляцию. Минорный аллель rs1805126 ассоциирован со сниженной экспрессией сердечного *SCN5A*, а у субъектов с сердечной недостаточностью, гомозиготных по минорному аллелю, снижена фракция выброса и повышена смертность, хотя не повышена частота встречаемости желудочковых тахикардий [20]. Об ассоциации данных полиморфизмов и формированием в дальнейшем хронической сердечной недостаточности есть информация в ряде исследований

зарубежных коллег [21, 22].

Вклад АД в развитие ИМ и ремоделирование сердца после ОИМ очень важен. Поэтому проводятся исследования ключевых локусов, связанных с ИМ на предмет ассоциации не только с поражением КА, но и связи их с уровнем АД. Однонуклеотидные полиморфизмы (ОНП) в геномной области 9p21.3 связаны с ишемической болезнью сердца (ИБС), инфарктом миокарда и кальцификацией коронарных артерий (ККА). Предыдущие исследования установили связь между показателями АД и ККА. Чтобы изучить механизмы, с помощью которых геномная область 9p21.3 может влиять на риск ИБС, авторы исследовали, изменяют ли ОНП в локусе 9p21.3 ассоциации между АД и уровнем ККА [23]. 974 пациентам была проведена компьютерная томография (КТ) для измерения количества ККА. Линейные модели смешанных эффектов использовались для исследования того, изменяют ли семь ОНП в области 9p21.3 связь между уровнями артериального давления и количеством ККА. Затем четыре SNP были протестированы для репликации в группе потомков Framingham Heart Study (n = 1140). Один ОНП (rs2069416) в CDKN2B-AS1 значительно модифицировал связь между диастолическим артериальным давлением (ДАД) и количеством ККА ($p = 0,0065$; $p = 0,0455$ с поправкой Бонферрони). Таким образом, взаимосвязь между ДАД и ККА зависит от генетической изменчивости в области 9p21.3. Изменение 9p21.3 может быть не только независимым генетическим фактором риска ИБС, но также может модифицировать связь между уровнями ДАД и степенью субклинического коронарного атеросклероза [23].

Гипертоническое ремоделирование сердца оцениваемое морфологически с помощью таких параметров, как увеличение индекса массы левого желудочка (ЛЖ), и/или относительной толщины стенки ЛЖ $>0,42$, и функционально по изолированному изменению диастолы ЛЖ (аномальное расслабление) ассоциировано с ОНП генов, участвующих в ренин-ангиотензин-альдостероновой системе [24].

Артериальная гипертензия и/или инфаркт миокарда являются частыми причинами сердечной недостаточности, особенно на фоне диабета 2-го типа.

Прогрессированию сердечной недостаточности обычно предшествует желудочковая дисфункция, связанная с изменениями внеклеточного матрикса, опосредованными матриксными металлопротеиназами. Минорный аллель T генетического варианта rs3918242 в промоторной области гена MMP-9 ассоциирован с повышенным риском инфаркта миокарда, снижением фракции выброса и более выраженным прогрессированием систолических нарушений левого желудочка, которые, как известно, являются предвестниками сердечной недостаточности. Возможно дальнейшие исследования MMP-9 в качестве биомаркера желудочковой дисфункции станут основанием для оценки применения ингибиторов MMP-9 с целью профилактики сердечной недостаточности при диабете, с артериальной гипертензией, особенно после инфаркта миокарда. Так как это неблагоприятное сочетание часто приводит к прогрессированию дисфункционального ремоделирования сердца у пациентов без исходно симптоматической сердечной недостаточности [25].

Известно, что мутации в саркомерных генах являются частой генетической причиной кардиомиопатий. Интронная делеция 25 п.н. в сердечном миозин-связывающем белке C (*MYBPC3*) в 3'-области связана с дилатационными и гипертрофическими кардиомиопатиями в Юго-Восточной Азии. Однако частота полиморфизмов саркомерных генов и связанные с ними клинические проявления не были установлены при дисфункции левого желудочка (ДЛЖ/LVD). Индийскими авторами [26] была изучена ассоциация делеции 25 п.н. в гене *MYBPC3*, 18 п.н. в гене *TTN*, 5 п.н. в гене *TNNT2* и полиморфизма K2906N гена *SMYA5* с LVD. В исследование включили 988 пациентов с ангиографически подтвержденной ИБС и 300 здоровых людей из контрольной группы. Среди 988 пациентов с ИБС 253 человека со сниженной фракцией выброса левого желудочка (ФВЛЖ) $\leq 45\%$ были классифицированы как ДЛЖ. Делецию 25 п.н. гена *MYBPC3*, 18 п.н. гена *TTN* и 5 п.н. гена *TNNT2* I/D определяли с помощью ПЦР, а полиморфизм K2906N гена *SMYA5* - с помощью анализа TaqMan. Делеция 25 п.н. гена *MYBPC3* была в значительной степени связана с повышенным риском LVD (ФВЛЖ $< 45\%$) (здоровые контроли по сравнению с

LVD: OR = 3,85, P <0,001; и не LVD по сравнению с LVD: OR = 1,65, P = 0,035), в то время как делеция 18 п.н. гена *TTN*, и делеция 5 п.н. гена *TNNT2* K2906N гена *SMYD5* не показали какой-либо значимой связи с LVD. Делеция 25 п.н. гена *MYBPC3* была ассоциирована с другими параметрами ремоделирования левого желудочка (ЛЖ), то есть с размерами ЛЖ (конечный диастолический размер ЛЖ): P=0,037 и конечный систолический размер ЛЖ: P=0.032). То есть делеция 25 п.н. *MYBPC3* может играть значительную роль в развитии LVD, а также ИБС у населения северной Индии [26].

Ещё одним фактором развития дисфункции левого желудочка (ДЛЖ) является воспаление, которое усугубляет неблагоприятные влияния на сердце других факторов. У некоторых пациентов с относительно небольшими инфарктами наблюдается неблагоприятное ремоделирование, тогда как у других пациентов с большими инфарктами этого не происходит. Есть ряд данных, подтверждающих гипотезу о том, что индивидуальные наследственные различия в интенсивности воспалительной реакции после ОИМ с участием одного или нескольких воспалительно-модулирующих путей могут способствовать неблагоприятному ремоделированию ЛЖ. Соответственно, учёт индивидуальных особенностей воспалительной реакции может дать новые терапевтические цели и стратегии. [27].

В ряде исследований была показана связь между полиморфизмом бета-адренергических рецепторов и клиническими исходами у пациентов с хронической сердечной недостаточностью (ХСН) и последующим ОКС. Основной механизм может быть связан с различиями в ремоделировании левого желудочка. Поэтому в США было предпринято изучение взаимосвязи между ремоделированием ЛЖ после ИМ и полиморфизмами в генах *ADRB1* (rs1801253, Arg389Gly; rs1801252, Ser49Gly) и *ADRB2* (rs1042713, Arg16Gly; rs1042714, Gln27Glu). После первого ИМ с подъемом сегмента ST у 122 пациентов (США), получавших длительную терапию блокаторами рецепторов β_1 (селективные бета-блокаторы), была проведена оценка исходного объема ЛЖ и через 6 месяцев. Было обнаружено, что пациенты, гомозиготные по аллелю Glu27

rs1042714, в 5,2 раза чаще попадали в группу с наивысшим прогрессирующим конечного систолического объема (КСО) (ОШ 5,2, 95% ДИ 1,4–19,0). Они также с большей вероятностью имели максимальную прогрессию конечного диастолического объема (КДО) и снижение ФВ ЛЖ. Для лиц с исходной дисфункцией ЛЖ гомозиготность по аллелю Arg389 rs1801253 ассоциировалась со снижением КСО (-46 мл, ДИ -3,1, -88,0) и КДО (-40 мл, ДИ -1,1, - 79,0) и увеличение ФВ ЛЖ (11%, ДИ 0,3, 22,0). Полиморфизмы генов *ADRB1* и *ADRB2* связаны с дифференциальным ремоделированием ЛЖ у пациентов, получавших селективные бета-блокаторы после инфаркта миокарда с подъемом сегмента ST [28]. Однако в Греции не обнаружили различий между носителями разных генотипов по rs1042714 (Gln27Glu) гена *ADRB2* [29]. В Южной Корее наблюдали 100 пациентов со стабильной сердечной недостаточностью (ФВЛЖ < 45%). Включенные в исследование пациенты получали лечение бисопрололом в течение 1 года. Пациенты носители генотипа Arg389Arg (ген *ADRB1*, rs1801253, Arg389Gly) требовали значительно большей дозы бисопролола по сравнению с носителями генотипов Gly389Arg и Gly389Gly ($5,26 \pm 2,62$ мг против $3,96 \pm 2,05$ мг, $p = 0,022$). Авторы полагают, что это указывает на возможность индивидуального подбора терапии β -блокаторами в соответствии с генотипом. При этом не было обнаружено никаких существенных различий в изменениях фракции выброса или ремоделировании ЛЖ между носителями разных генотипов [30]. Таким образом, связь между полиморфизмом бета-адренергических рецепторов и такими показателями как ответ на терапию бета-блокаторами, ремоделирование ЛЖ, клинические исходы у пациентов с ОКС последующим с ХСН находится в процессе изучения. Пока неясно с чем связаны полученные различия: с дизайном исследований, этнической принадлежностью, другими, не включёнными в анализ факторами [31]. Требуется обобщение результатов отдельных относительно небольших исследований в рамках мета-анализов.

Как известно, длина теломер является биологическим маркером старения, которое, в свою очередь, является фактором риска проявления сердечно-

сосудистых заболеваний. Была проанализирована когорта из 1106 пациентов с гипертонией с фракцией выброса (ФВ) более 40% и документально подтвержденными ССЗ или поражением органов-мишеней. В многофакторном анализе длина теломер лейкоцитов (ДТЛ) была положительно связана с увеличением ИММЛЖ и ФВ. Один полиморфизм rs16847897 рядом с геном TERC (telomerase RNA component) показал значительную ассоциацию с ФВ. Кроме того, были найдены ещё 2 ОНП в гене VICD1 rs2630578 и rs1151026 ассоциированные с ФВ. Таким образом получается, что генетические маркёры, ассоциированные с ДТЛ, имеют также ассоциацию с ИММЛЖ и ФВ у пациентов с гипертонией [32], и без повышенного артериального давления [33, 34]

Задача по поиску молекулярно-генетических маркёров, связанных с ремоделированием ЛЖ и ХСН очень сложна. Методы исследований постоянно совершенствуются и в настоящее время помимо небольших ассоциативных исследований проводится всё больше масштабных проектов: популяционных, проспективных, полногеномных ассоциативных, омиксных и др. В исследованиях формируется и проверяется множество гипотез, часть которых оказывается несостоятельной. Так в крупном проспективном исследовании ARIC в связи с тем, что недавно β -амилоид был обнаружен в миокарде пациентов с болезнью Альцгеймера, проверили связь $\epsilon 4$ гена APOE с развитием ХСН, NT-proBNP и структурой и функцией сердца. Ассоциаций не обнаружено [35].

Большая группа учёных из США выполнила крупномасштабный мета-анализ сердечной недостаточности в GWAS с репликацией в когорте сопоставимого размера для подтверждения одного известного и двух новых локусов, связанных с сердечной недостаточностью. Новый локус в хромосоме 1 связан с неблагоприятным ремоделированием левого желудочка и развитием сердечной недостаточности в ответ на различные небольшие повреждения сердечной мышцы. Функциональная характеристика и точное картирование этого локуса позволили найти предполагаемый причинный вариант в специфической регуляторной области гена ACTN2, который кодирует важный структурный белок внутри сердечной сарколеммы и активируется во время

дифференцировки кардиомиоцитов. Эксперимент по редактированию генома в кардиомиоцитах, полученных из эмбриональных стволовых клеток, подтвердил влияние идентифицированной регуляторной области на экспрессию ACTN2. Именно такие глубокие фундаментальные исследования, использующие обширный инструментарий расширяют наше понимание биологических механизмов, лежащих в основе сердечной недостаточности [36].

В Framingham Heart Study авторы оценили 8372 участников (54% женщин, средний возраст 55 ± 17 лет). Из них у 62 (0,7%) и 35 (0,4%) преобладала СН со сниженной фракцией выброса и СН с сохраненной ФВЛЖ соответственно. В течение среднего периода наблюдения 8,5 лет у 223 (2,7%) и 234 (2,8%) пациентов развилась СН со сниженной фракцией выброса и СН с сохраненной ФВЛЖ соответственно. Основные гены включали MMP20 и MTSS1, способствуют сборке актина в межклеточных соединениях - для систолической функции левого желудочка; ITGA9 рецептор для VCAM1 протеин 1 сосудистой клетки и C5 - для ремоделирования левого желудочка; NUP210 экспрессируется во время миогенной дифференцировки и ANK1 белок цитоскелета - для диастолической функции; TSPAN16 и RAB11FIP3, участвующие в регуляции актинового цитоскелета – для всех случаев СН со сниженной фракцией выброса; ANKRD13D и TRIM69 - для новых случаев СН со сниженной фракцией выброса; NPCAL1 и PTTG1IP - для всех случаев СН со сниженной фракцией выброса; и ZNF146 (близкий к ферменту COX7A1) и ZFP3 (близкий к SLC52A1 транспортер рибофлавина) - для новых случаев СН со сниженной фракцией выброса. Авторы протестировали основные ОНП, связанные с СН, в биобанке Великобритании. rs77059055 в гене TPM1 (частота минорного аллеля 0,023; отношение шансов 0,83; $P = 0,002$) остался статистически значимым после коррекции Бонферрони. Это ещё один пример того, как интегративный подход к трансомике дает представление о потенциальных молекулярных и генетических факторах, влияющих на СН [37].

В других современных масштабных биоинформационных исследованиях проблема СН изучается комплексно с привлечением огромного массива данных с

использованием авторских оригинальных усовершенствованных методов анализа с целью поиска специфических прогностических биомаркёров и кандидатов в терапевтические мишени для постинфарктной СН. Ряд авторов изучили влияние полиморфизма rs5186 гена AGTR1 на сократительную способность миокарда [38-41]. При изучении других генов авторы [42] провели взвешенный анализ сети коэкспрессии генов для определения ключевых модулей, узловых генов и возможных регуляторных мишеней, участвующих в развитии СН после ОИМ. Гены, демонстрирующие наибольшие изменения уровней экспрессии в образцах, были включены в анализ. В общей сложности было идентифицировано 10 265 наиболее разнообразных генов и шесть модулей между пациентами с ОИМ, у которых развилась СН в течение 6 месяцев наблюдения, и теми, у кого ее не было. Один из модулей был наиболее значимо связан с развитием постинфарктной СН. Функциональный анализ обогащения показал, что этот модуль был в первую очередь связан с воспалительными реакциями, иммунной системой и апоптозом. Семь транскрипционных факторов, включая SPI1, ZBTB7A, IRF8, PPARG, P65, KLF4 и Fos, были идентифицированы как потенциальные регуляторы экспрессии генов. Кроме того, было установлено, что некодирующие рибонуклеиновые кислоты (РНК), включая miR-142-3p и LINC00537, тесно взаимодействуют с генами из этого модуля. Всего шесть узловых генов (*BCL3*, *HCK*, *PPIF*, *S100A9*, *SERPINA1* и *TBC1D9B*) были идентифицированы и проверены на предмет их прогностической ценности при определении вероятности развития СН. Такой подход обеспечивает новое понимание лежащих в основе развития СН после ОИМ молекулярных механизмов и молекулярных маркеров, что может помочь улучшить стратификацию риска, терапевтические решения и точность оценки прогноза развития СН у пациентов с ОИМ [42].

Таким образом, сохранение сократительной способности миокарда после перенесенного ОИМ является важнейшей задачей во время лечения пациентов с этой тяжелой патологией. Результаты проанализированных нами исследований позволяют сделать вывод, что генетические особенности пациентов оказывают

влияние на сократительную способность сердца больных, перенесших ИМ. Применение генетических методов при обследовании пациентов и дальнейший учет индивидуальных особенностей при назначении терапии позволит реализовать персонализированный подход к каждому больному, что позволит повысить эффективность проводимых терапевтических мероприятий и безусловно должно позитивно сказаться на прогнозе заболевания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 2020 Clinical practice guidelines for Acute ST-segment elevation myocardial infarction. Russian Journal of Cardiology. 2020;25(11):4103. (In Russ.) Острый инфаркт миокарда с подъемом сегмента ST электрокардиограммы. Клинические рекомендации 2020. Российский кардиологический журнал. 2020;25(11):4103. doi:10.15829/1560-4071-2020-4103.
2. 2020 ESC Guidelines for the management of acute coronary syndromes in patients presenting without persistent ST-segment elevation Russian Journal of Cardiology. 2021;26(3):4418. (In Russ.) Рекомендации ESC по ведению пациентов с острым коронарным синдромом без стойкого подъема сегмента ST 2020. Российский кардиологический журнал. 2021;26(3):4418 doi:10.15829/1560-4071-2021-4418.
3. Acute myocardial infarction with ST segment elevation electrocardiograms: rehabilitation and secondary prevention. Russian clinical guidelines. CardioSomatica. 2014;S1:5-41. (In Russ.) Острый инфаркт миокарда с подъемом сегмента ST электрокардиограммы: реабилитация и вторичная профилактика. Российские клинические рекомендации //CardioСоматика. 2014;S1:5-41. doi:[10.15829/1560-4071-2015-1-6-52](https://doi.org/10.15829/1560-4071-2015-1-6-52).
4. Cardiovascular Prevention 2017. National guidelines. Russian Journal of Cardiology. 2018;23(6):7-122. (In Russ.) Кардиоваскулярная профилактика 2017. Российские национальные рекомендации. Российский кардиологический журнал. 2018;23(6):7–122. <http://dx.doi.org/10.15829/1560-4071-2018-6-7-122>.
5. Lozhkina N. G., Tolmacheva A. A., Khasanova M. X., et al. Genetic predictors of

- five-year outcomes of acute coronary syndrome. *Russian Journal of Cardiology*. 2019;24(10):86–90 (In Russ.) Ложкина Н. Г., Толмачева А. А., Хасанова М. Х., и др. Генетические предикторы пятилетних исходов перенесенного острого коронарного синдрома. *Российский кардиологический журнал*. 2019;24(10):86–90 doi:10.15829/1560-4071-2019-10-86-90.
6. Ponasenko A. V., Tsepokina A. V., Khutornaya M. V., et al. Interleukin 18 levels in patients with stable coronary artery disease is associated with IL18RAP and IL18R1 gene polymorphism and the risk of myocardial infarction. *Russian Journal of Cardiology*. 2020;25(10):42-48. (In Russ.) Понасенко А. В., Цепочкина А. В., Хуторная М. В., и др. Концентрация интерлейкина-18 у пациентов со стабильной формой ишемической болезни сердца ассоциирована с полиморфизмом генов IL18RAP и IL18R1 и риском развития инфаркта миокарда. *Российский кардиологический журнал*. 2020;25(10):42-48. doi:10.15829/1560-4071-2020-3977.
7. Vakhrushev Yu. A., Kuular A. A., Lebedeva V. K., et al. RBM20 gene variants associated with left atrial dilatation in patients with old myocardial infarction and heart failure with reduced ejection fraction. *Russian Journal of Cardiology*. 2021;26(10):9-15. (In Russ.) Вахрушев Ю. А., Куулар А. А., Лебедева В. К., и др. Варианты гена RBM20, ассоциированные с дилатацией левого предсердия у пациентов с постинфарктным кардиосклерозом и сердечной недостаточностью с низкой фракцией выброса. *Российский кардиологический журнал*. 2021;26(10):9-15. doi:10.15829/1560-4071-2021.
8. Pecherina T. B., Kutikhin A. G. Biomarkers of myocardial fibrosis and their genetic regulation in patients with heart failure. *Russian Journal of Cardiology*. 2020;25(10):139-144. (In Russ.) Печерина Т. Б., Кутихин А. Г. Биомаркеры фиброза миокарда и их генетическое регулирование у пациентов с сердечной недостаточностью. *Российский кардиологический журнал*. 2020;25(10):139-144. doi:10.15829/1560-4071-2020-39.
9. Park S, Nguyen NB, Pezhouman A, et al. Cardiac fibrosis: potential therapeutic targets. *Transl Res*. 2019; 209:121-37. doi:10.1016/j.trsl.2019.03.001.
10. Fan Z, Guan J. Antifibrotic therapies to control cardiac fibrosis. *Biomater Res*.

2016; 20:13. doi:10.1186/s40824-016-0060-8.

11. Sundström J, Sullivan L, Selhub J, Benjamin EJ, D'Agostino RB, Jacques PF, Rosenberg IH, Levy D, Wilson PW, Vasani RS; Framingham Heart Study. Relations of plasma homocysteine to left ventricular structure and function: the Framingham Heart Study. *Eur Heart J*. 2004 Mar;25(6):523-30. doi: 10.1016/j.ehj.2004.01.008. PMID: 15039133.
12. Nasir K, Tsai M, Rosen BD, Fernandes V, Bluemke DA, Folsom AR, Lima JA. Elevated homocysteine is associated with reduced regional left ventricular function: the Multi-Ethnic Study of Atherosclerosis. *Circulation*. 2007 Jan 16;115(2):180-7. doi: 10.1161/CIRCULATIONAHA.106.633750. Epub 2007 Jan 2. PMID: 17200444.
13. Wargny M, Croyal M, Ragot S, Gand E, Jacobi D, Trochu JN, Prieur X, Le May C, Goronflot T, Cariou B, Saulnier PJ, Hadjadj S; SURDIAGENE study group. Nutritional biomarkers and heart failure requiring hospitalization in patients with type 2 diabetes: the SURDIAGENE cohort. *Cardiovasc Diabetol*. 2022 Jun 9;21(1):101. doi: 10.1186/s12933-022-01505-9. PMID: 35681209; PMCID: PMC9185908.
14. Bajic Z, Sobot T, Skrbic R, Stojiljkovic MP, Ponorac N, Matavulj A, Djuric DM. Homocysteine, Vitamins B6 and Folic Acid in Experimental Models of Myocardial Infarction and Heart Failure-How Strong Is That Link? *Biomolecules*. 2022 Apr 1;12(4):536. doi: 10.3390/biom12040536. PMID: 35454125; PMCID: PMC9027107.
15. Rallidis LS, Kosmas N, Stathopoulou E, Rallidi M, Gialeraki A. Homozygosity of the TT methylenetetrahydrofolate reductase C677T genotype is an independent long-term predictor of cardiac death in patients with premature myocardial infarction. *Curr Med Res Opin*. 2021 Jul;37(7):1079-1084. doi: 10.1080/03007995.2021.1912720. Epub 2021 Apr 21. PMID: 33813997.
16. Lin P, Li H, Yu T, Liu Y. The Effect of Angiotensin-Converting Enzyme Gene Polymorphisms on the Clinical Efficacy of Perindopril Prescribed for Acute Myocardial Infarction in Chinese Han Patients. *Genet Test Mol Biomarkers*. 2019;23(5):316-324. doi: 10.1089/gtmb.2018.0232. Epub 2019 Apr 3. PMID:

30942616.

17. Srettabunjong, S., Eakkunnathum, D., Thongnoppakhun, W. and Sripichai, O., 2019. Association between SCN5A and sudden unexplained nocturnal death syndrome in Thai decedents: a case–control study. *Egyptian Journal of Forensic Sciences*, 9(1), pp.1-9.
18. Daimi, H., Khelil, A.H., Neji, A., Hamda, K.B., Maaoui, S., Aranega, A., Chibani, J.B. and Franco, D., 2019. Role of SCN5A coding and non-coding sequences in Brugada syndrome onset: What's behind the scenes?. *biomedical journal*, 42(4), pp.252-260.
19. Kapoor, A., Lee, D., Zhu, L., Soliman, E.Z., Grove, M.L., Boerwinkle, E., Arking, D.E. and Chakravarti, A., 2019. Multiple SCN5A variant enhancers modulate its cardiac gene expression and the QT interval. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 116(22), pp.10636-10645.
20. Zhang, X., Yoon, J.Y., Morley, M., McLendon, J.M., Mapuskar, K.A., Gutmann, R., Mehdi, H., Bloom, H.L., Dudley, S.C., Ellinor, P.T. and Shalaby, A.A., 2018. A common variant alters SCN5A–miR-24 interaction and associates with heart failure mortality. *The Journal of clinical investigation*, 128(3), pp.1154-1163.
21. Boudreau, R.L., Spengler, R.M., Skeie, J.M., Zhang, X., Cheng, C., Yoon, J.Y., Gutmann, R.A., Bloom, H.L., Dudley, S.C., Ellinor, P.T. and Shalaby, A.A., 2015. No longer silent: a synonymous coding SNP modifying a novel microRNA-24: SCN5A interaction associates With Non-arrhythmic death in heart failure. *Circulation*, 132(suppl_3), pp.A17984-A17984.
22. Boudreau, R.L., Zhang, X., McLendon, J.M., Kutschke, W., Anderson, E.J. and London, B., 2019. Reduced expression of the cardiac sodium channel Nav1. 5 triggers enhanced fatty acid metabolism and oxidative stress. *Circulation research*, 125(Suppl_1), pp.A271-A271.
23. Kim DS, Smith JA, Bielak LF, Wu CY, Sun YV, Sheedy PF 2nd, Turner ST, Peyser PA, Kardia SL. The relationship between diastolic blood pressure and coronary artery calcification is dependent on single nucleotide polymorphisms on chromosome 9p21.3. *BMC Med Genet*. 2014 Sep 4;15:89. doi: 10.1186/s12881-014-0089-2. PMID: 25185447; PMCID: PMC4168694.

24. Mocan O, Rădulescu D, Buzdugan E, Cozma A, Leucuta DC, Bogdan SA, Procopciuc LM. Association between polymorphisms of genes involved in the Renin-Angiotensin-Aldosterone System and the adaptive morphological and functional responses to essential hypertension. *Biomed Rep.* 2021 Oct;15(4):80. doi: 10.3892/br.2021.1456. Epub 2021 Aug 4. PMID: 34429966; PMCID: PMC8372125.
25. Watson C, Spiers JP, Waterstone M, Russell-Hallinan A, Gallagher J, McDonald K, Ryan C, Gilmer J, Ledwidge M. Investigation of association of genetic variant rs3918242 of matrix metalloproteinase-9 with hypertension, myocardial infarction and progression of ventricular dysfunction in Irish Caucasian patients with diabetes: a report from the STOP-HF follow-up programme. *BMC Cardiovasc Disord.* 2021 Feb 12;21(1):87. doi: 10.1186/s12872-021-01860-7. PMID: 33579197; PMCID: PMC7879511.
26. Kumar S, Mishra A, Srivastava A, Bhatt M, Garg N, Agarwal SK, Pande S, Mittal B. Role of common sarcomeric gene polymorphisms in genetic susceptibility to left ventricular dysfunction. *J Genet.* 2016 Jun;95(2):263-72. doi: 10.1007/s12041-016-0623-4. PMID: 27350668.
27. Westman PC, Lipinski MJ, Luger D, Waksman R, Bonow RO, Wu E, Epstein SE. Inflammation as a Driver of Adverse Left Ventricular Remodeling After Acute Myocardial Infarction. *J Am Coll Cardiol.* 2016 May 3;67(17):2050-60. doi: 10.1016/j.jacc.2016.01.073. PMID: 27126533.
28. McLean RC, Hirsch GA, Becker LC, Kasch-Semenza L, Gerstenblith G, Schulman SP. Polymorphisms of the beta adrenergic receptor predict left ventricular remodeling following acute myocardial infarction. *Cardiovasc Drugs Ther.* 2011 Jun;25(3):251-8. doi: 10.1007/s10557-011-6307-7. PMID: 21626217.
29. Metaxa S, Missouris C, Mavrogianni D, Miliou A, Oikonomou E, Toli E, Kormali L, Vlismas A, Drakakis P, Tousoulis D. Polymorphism Gln27Glu of β_2 Adrenergic Receptors in Patients with Ischaemic Cardiomyopathy. *Curr Vasc Pharmacol.* 2018;16(6):618-623. doi: 10.2174/1570161115666170919180959. PMID: 28933308.
30. Lee HY, Chung WJ, Jeon HK, Seo HS, Choi DJ, Jeon ES, Kim JJ, Shin JH, Kang

- SM, Lim SC, Baek SH. Impact of the β -1 adrenergic receptor polymorphism on tolerability and efficacy of bisoprolol therapy in Korean heart failure patients: association between β adrenergic receptor polymorphism and bisoprolol therapy in heart failure (ABBA) study. *Korean J Intern Med.* 2016 Mar;31(2):277-87. doi: 10.3904/kjim.2015.043. Epub 2016 Feb 16. PMID: 26879662; PMCID: PMC4773723.
31. Metra M, Covolo L, Pezzali N, et al. Role of beta-adrenergic receptor gene polymorphisms in the long-term effects of beta-blockade with carvedilol in patients with chronic heart failure. *Cardiovasc Drugs Ther.* 2010;24(1):49-60. doi:10.1007/s10557-010-6220-5
 32. Huber M, Treszl A, Wehland M, et al. Genetic variants implicated in telomere length associated with left ventricular function in patients with hypertension and cardiac organ damage. *J Mol Med (Berl).* 2012;90(9):1059-1067. doi:10.1007/s00109-012-0874-3
 33. Cui, G., Sun, J., Zhang, L., Li, R., Wang, Y., Cianflone, K., Ding, H. and Wang, D.W., 2014. Lack of causal relationship between leukocyte telomere length and coronary heart disease. *Atherosclerosis*, 233(2), pp.375-380.
 34. Li, Y., Cheang, I., Zhang, Z., Yao, W., Zhou, Y., Zhang, H., Liu, Y., Zuo, X., Li, X. and Cao, Q., 2021. Prognostic Association of TERC, TERT Gene Polymorphism, and Leukocyte Telomere Length in Acute Heart Failure: A Prospective Study. *Frontiers in endocrinology*, 12, p.650922.
 35. Selvaraj S, Claggett B, Johansen MC, Cunningham JW, Gottesman RF, Yu B, Boerwinkle E, Mosley TH, Shah AM, Solomon SD. Apolipoprotein E Polymorphism, Cardiac Remodeling, and Heart Failure in the ARIC Study. *J Card Fail.* 2022 Jul;28(7):1128-1136. doi: 10.1016/j.cardfail.2021.12.011. Epub 2021 Dec 26. PMID: 34965472.
 36. Arvanitis M, Tampakakis E, Zhang Y, Wang W, Auton A; 23andMe Research Team, Dutta D, Glavaris S, Keramati A, Chatterjee N, Chi NC, Ren B, Post WS, Battle A. Genome-wide association and multi-omic analyses reveal ACTN2 as a gene linked to heart failure. *Nat Commun.* 2020 Feb 28;11(1):1122. doi: 10.1038/s41467-020-14843-7. PMID: 32111823; PMCID: PMC7048760.

37. Andersson C, Lin H, Liu C, Levy D, Mitchell GF, Larson MG, Vasani RS. Integrated Multiomics Approach to Identify Genetic Underpinnings of Heart Failure and Its Echocardiographic Precursors: Framingham Heart Study. *Circ Genom Precis Med*. 2019 Dec;12(12):e002489. doi: 10.1161/CIRCGEN.118.002489. Epub 2019 Nov 8. PMID: 31703168.
38. Wu, C.K., Tsai, C.T., Chang, Y.C., Luo, J.L., Wang, Y.C., Hwang, J.J., Lin, J.L., Tseng, C.D. and Chiang, F.T., 2009. Genetic polymorphisms of the angiotensin II type 1 receptor gene and diastolic heart failure. *Journal of hypertension*, 27(3), pp.502-507.
39. Mishra, A., Srivastava, A., Kumar, S., Mittal, T., Garg, N., Agarwal, S.K., Pande, S. and Mittal, B., 2015. Role of angiotensin II type I (AT1 A1166C) receptor polymorphism in susceptibility of left ventricular dysfunction. *indian heart journal*, 67(3), pp.214-221.
40. Moe, S.M., Long, J., Schwantes-An, T.H.L., Decker, B.S., Wetherill, L., Edenberg, H.J., Xuei, X., Vatta, M., Foroud, T.M. and Chertow, G.M., 2019. Angiotensin-related genetic determinants of cardiovascular disease in patients undergoing hemodialysis. *Nephrology Dialysis Transplantation*, 34(11), pp.1924-1931.
41. Peters, L.J., Biessen, E.A., Hohl, M., Weber, C., Van der Vorst, E.P. and Santovito, D., 2020. Small things matter: relevance of microRNAs in cardiovascular disease. *Frontiers in physiology*, 11, p.793.
42. Niu X, Zhang J, Zhang L, Hou Y, Pu S, Chu A, Bai M, Zhang Z. Weighted Gene Co-Expression Network Analysis Identifies Critical Genes in the Development of Heart Failure After Acute Myocardial Infarction. *Front Genet*. 2019 Nov 26;10:1214. doi: 10.3389/fgene.2019.01214. PMID: 31850068; PMCID: PMC6889910.

ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ МЕТОД АНАЛИЗА ЧАСТОТНЫХ ПОГРЕШНОСТЕЙ РЕЗИСТИВНЫХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ПЕРЕМЕННЫХ СИГНАЛОВ

Л.Р. Григорьян, Н.М. Богатов, Р.Л. Григорьян

Кубанский государственный университет,

leonmezon@mail.ru

Исследование физических процессов, однозначно отображающих состояния какого-либо объекта наблюдения, является основной задачей познания. Для передачи сведения о состоянии источника информации, выраженное в определенной форме и предназначенное для передачи от источника информации к адресату, на практике чаще всего используют электрические сигналы, при этом носителем информации является изменяющиеся во времени ток или напряжение в электрической цепи.

Измерение амплитудных параметров электрических сигналов, наряду с частотными и фазовыми характеристиками, являются наиболее массовыми в практике электронных измерений [1]. Применимо к измерению амплитудных параметров сигналов одним из ключевых элементов, определяющих точность данной процедуры, является входной резистивный делитель, осуществляющий необходимое масштабирование во всем диапазоне исследуемых сигналов. Возникающая при этом погрешность масштабирования определяется в основном шунтирующими свойствами нижнего плеча резистивного делителя и комплексным сопротивлением нагрузки.

Значение этой погрешности можно оценить по формуле (1):

$$\Delta K\% = -50(R_2 C_H 2\pi f)^2, \quad (1)$$

где R_2 – значение нижнего плеча резистивного делителя; C_H – емкость нагрузки; f – частота входного сигнала.

При определенных условиях значение этой погрешности достигает значительной величины. Например, при $R_2 = 1$ кОм, $C_H = 100$ пф, $f = 1$ МГц погрешность $\Delta K\%$ составляет около 20%.

Для уменьшения частотной погрешности делителя используют

корректирующий конденсатор, который включают параллельно верхнему плечу делителя. Однако, применение этого метода эффективно только в узком частотном диапазоне. Поэтому задача полной коррекции частотной погрешности резистивных делителей является актуальной [2, 3].

Цель исследования – анализ частотных погрешностей резистивных преобразователей.

В работе, для решения поставленной задачи предложено применить структурное моделирование делителя, позволяющее выделить необходимую составляющую данной погрешности, с последующей ее коррекцией программно-аппаратным способом.

На рисунке 1 приведена структурная схема измерителя амплитудных параметров сигнала, в котором реализован предложенный способ решения поставленной задачи. Устройство содержит: основной и дополнительный резистивные делители D_1 и D_2 , буферный усилитель **БУ**, программируемые электронные ключи K_1, \dots, K_4 , преобразователь переменного напряжения в постоянное **ПН**, аналогово-цифровой преобразователь **АЦП**, микроконтроллер **МК**, регистрирующее устройство **РУ**.

Основными элементами, влияющими на частотную составляющую погрешности, в данном устройстве являются входное сопротивление преобразователя **ПН**, которое имеет комплексный характер, и паразитная емкость, шунтирующая нижнее плечо делителя D_2 . Поскольку оба элемента включаются параллельно друг другу, то целесообразно объединить их и обозначить комплексным сопротивлением **Z**.

Процесс измерения переменного напряжения в таком измерительном устройстве осуществляется в три такта. В первом такте ключи K_1, \dots, K_4 соединяют между собой устройства так, как показано на рисунке 1.

Входное напряжение при этом поступает на вход преобразователя **ПН** через основной делитель D_2 , включенный традиционным способом. На выходе **АЦП** формируется код N_1 пропорциональный выходному напряжению преобразователя **ПН**:

$$U_1 = U_{\text{ВХ}} \frac{Z R_2}{Z(R_1 + R_2) + R_1 R_2}. \quad (2)$$

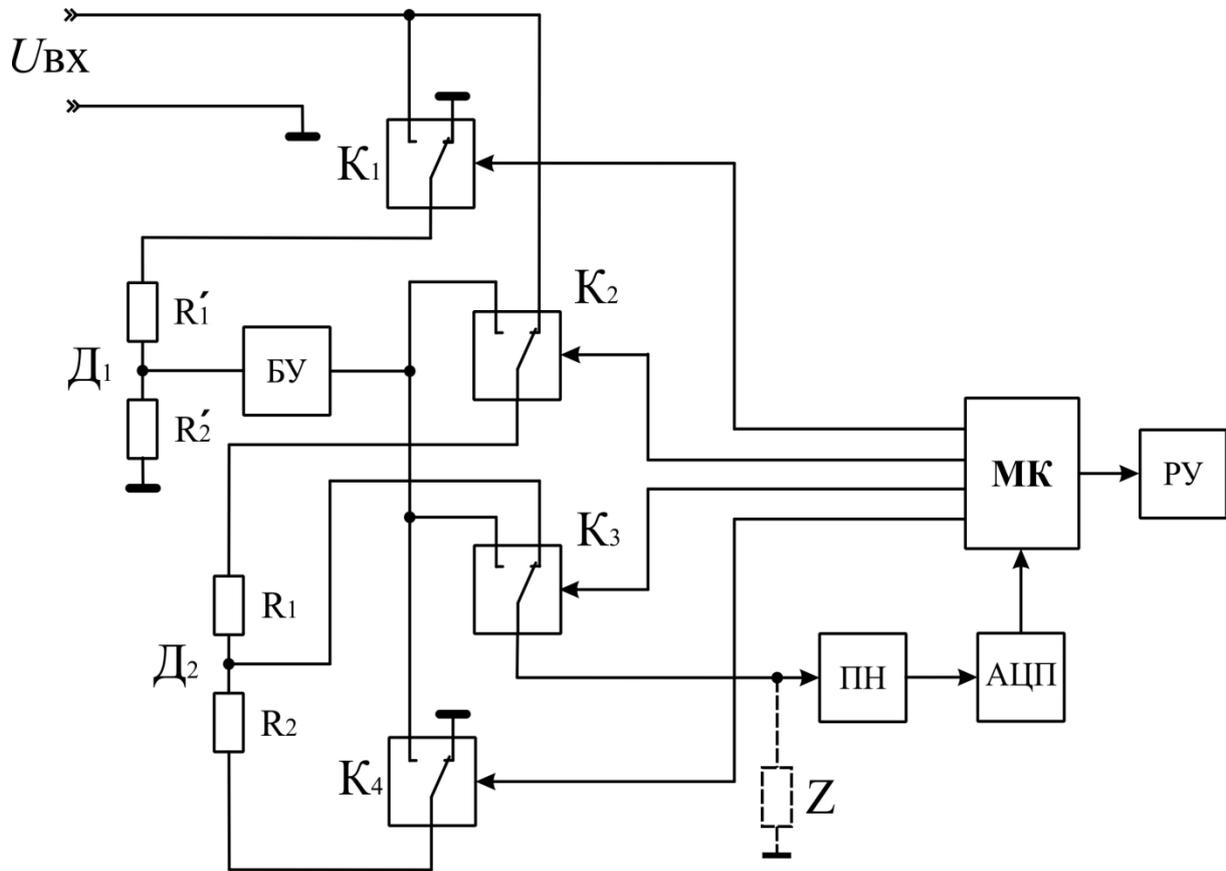


Рис. 1 – Структурная схема измерителя амплитудных параметров сигналов

Этот код поступает в микроконтроллер **МК**, осуществляющий фиксацию и запоминание его значения.

Во втором такте микроконтроллер **МК** используя коммутаторы **К₁**, **К₂** и **К₄** меняет конфигурацию схемы измерения. Выходное напряжение в этом такте через вспомогательный делитель **Д₁** и буферный усилитель **БУ** поступает на новый делитель напряжения, верхнее плечо которого образует параллельное включение **R₁** и **R₂**, а нижним плечом является комплексное сопротивление **Z**. Таким образом, на выходе **АЦП** формируется код **N₂**, пропорциональный напряжению **U₂** на входе преобразователя **ПН**:

$$U_2 = U_{\text{вх}} \frac{Z(R_1 + R_2)K_d K_y}{Z(R_1 + R_2) + R_1 R_2}, \quad (3)$$

где K_d – коэффициент передачи вспомогательного делителя D_1 ; K_y – коэффициент усиления буферного усилителя.

Коэффициент K_d должен быть примерно равным коэффициенту передачи основного делителя, а $K_y = 1$.

Значение кода N_2 фиксируется в микроконтроллере, одновременно формируется управляющий сигнал для коммутатора K_3 , и начинается третий такт.

В третьем такте входное напряжение через вспомогательный делитель D_1 и буферный усилитель $БУ$ подается непосредственно на вход преобразователя $ПН$. Поскольку входное сопротивление буферного усилителя намного меньше Z , то коэффициентом деления делителя, образованного этими элементами, можно пренебречь. Тогда на выходе АЦП образуется код N_3 , пропорциональный напряжению $U_3 = U_{\text{вх}} K_d K_y$. Этот код подается непосредственно в микроконтроллер, в котором формируется код:

$$N = \frac{N_1 N_3}{N_2}. \quad (4)$$

Полученный код пропорционален напряжению $U = U_1 U_3 / U_2 = U_{\text{вх}} R_2 / (R_1 + R_2)$. Это означает, что в конечном результате отсутствует частотная составляющая погрешности резистивного делителя, следовательно, применение вспомогательного делителя D_1 обеспечивает работу преобразователя $ПН$ в одном и том же динамическом диапазоне во всех трех тактах, что препятствует возникновению дополнительной погрешности нелинейности преобразователя.

По указанной структуре можно выполнить целый ряд различных устройств. Например, подключение к входу прецизионного образцового генератора переменного напряжения позволяет проводить измерения коэффициента передачи резистивного делителя в заданном частотном диапазоне. При этом использование в качестве преобразователя напряжения $ПН$ фазочувствительного детектора позволяет расширить применение данного

устройства для оценки фазочастотных погрешностей широкополосных делителей напряжения [4]. Наряду с анализом технических возможностей преобразователя сигналов не менее важен метрологический аспект его реализации. Очевидно, что такой анализ предполагает количественную оценку точности инструментальных погрешностей данного преобразователя.

Для определения погрешности обозначим сопротивления ключей R_{K_1}, \dots, R_{K_4} , а выходное сопротивление буферного усилителя R_y . С учетом принятых обозначений напряжения на входе преобразователя **ПН** в каждом такте будут определяться следующими выражениями:

$$U_1 = U_{\text{вх}} \frac{Z(R_2 + R_{K_4})}{(R_{K_2} + R_1)(R_2 + R_{K_4} + R_{K_2} + Z) + (R_2 + R_{K_4})(R_{K_2} + Z)}; \quad (5)$$

$$U_2 = U_{\text{вх}} K_D K_Y \frac{Z(R_{K_2} + R_{K_4} + R_1 + R_2)}{(R_y + Z)(R_{K_2} + R_{K_4} + R_1 + R_2) + (R_{K_2} + R_1 + R_{K_4} + R_2)}; \quad (6)$$

$$U_3 = \frac{U_{\text{вх}} K_D K_Y Z}{(R_y + R_{K_2} + Z)}. \quad (7)$$

Таким образом, выходной код N будет соответствовать напряжению U которое теперь будет определяться следующими выражениями:

$$U = U_{\text{вх}} \frac{Z(R_2 + R_{K_4})[(R_y + Z)(R_{K_2} + R_{K_4} + R_1 + R_2) + (R_{K_2} + R_1)(R_{K_4} + R_2)]}{[(R_{K_2} + R_1)(R_{K_4} + R_{K_2} + R_2 + Z) + (R_2 + R_{K_4})(R_{K_2} + Z)](R_y + R_{K_2} + Z)(R_{K_2} + R_{K_4} + R_1 + R_2)}. \quad (8)$$

Для оценки влияния значения сопротивления R_y положим $R_{K_1} = R_{K_2} = R_{K_3} = R_{K_4} = 0$. Тогда выражение (8) примет вид:

$$U = U_{\text{вх}} Z R_2 \left[\frac{1}{(R_y + Z)(R_1 + R_2)} + \frac{R_y}{Z(R_2 + R_1)(R_y + Z) + R_1 R_2 (R_y + Z)} \right]. \quad (9)$$

Сопротивление R_y на несколько порядков меньше, чем значение Z , поэтому последнюю дробь в выражении (9) можно считать равной нулю. Тогда (9) можно записать в виде:

$$U = U_{\text{вх}} \frac{R_2}{R_1 + R_2} \frac{Z}{R_y + Z} = U_{\text{вх}} \frac{R_2}{R_1 + R_2} \frac{K}{1 + K}. \quad (10)$$

где $K = Z/R_y$ – коэффициент, показывающий отношение входного сопротивления преобразователя напряжения **ПН** к выходному сопротивлению буферного усилителя **БУ**. Из (10) следует, что при $K = 10$ относительная погрешность составляет 10%, при $K = 100$ – 1% и т.д.

Современная элементная база позволяет реализовать буферные усилители

с выходным сопротивлением R_y менее одного Ом [5], что обеспечивает увеличение коэффициента $K = Z/R_y$ свыше 1000, при этом относительная погрешность измерения становится меньше 0,1%.

Для определения степени влияния значения сопротивления R_{K_2} ключа **К3**, примем $R_{K_1} = R_{K_2} = R_{K_4} = 0$. В этом случае получим выражение:

$$U = U_{\text{вх}} \left[\frac{R_2}{R_1 + R_2} \frac{Z}{R_{K_2} + Z} + \frac{R_{K_2} Z R_2}{[Z(R_2 + R_1) + R_1 R_2 + R_{K_2}(R_2 + R_1)](R_{K_2} + Z)} \right]. \quad (11)$$

В выражении (11) значение последней дроби можно считать равным нулю, так как значение R_{K_2} намного меньше значения Z . Тогда выражение (11) примет вид:

$$U = U_{\text{вх}} \frac{R_2}{R_1 + R_2} \frac{Z}{R_{K_2} + Z}, \quad (12)$$

т.е. влияние значения сопротивления R_{K_2} будет точно таким, как и влияние выходного сопротивления R_y буферного усилителя **БУ**. Приняв соответствующие условия, определим влияние значения сопротивления R_{K_2} ключа **К2**:

$$U = U_{\text{вх}} \frac{R_2}{(R_1 + R_2)} \frac{(R_1 + R_2)}{(R_1 + R_2 + R_{K_2})} = U_{\text{вх}} \frac{R_2}{(R_1 + R_2 + R_{K_2})}. \quad (13)$$

В этом случае влияние значения сопротивления R_{K_2} не зависит от значения Z , а определяется соотношением его значения и суммы сопротивлений $R_1 + R_2$.

В зависимости от значения этого соотношения возникающая составляющая погрешности будет по величине такой же, как и в предыдущем случае.

Для оценки влияния значения сопротивления R_{K_4} ключа **К4**, положим $R_{K_1} = R_{K_2} = R_y = 0$. В этом случае получим выражение:

$$U = U_{\text{вх}} \left[\left(\frac{R_2}{R_1 + R_2} \right) \left(\frac{R_1 + R_2}{(R_1 + R_2 + R_{K_4})} \right) + \left(\frac{R_{K_4}}{(R_1 + R_2 + R_{K_4})} \right) \right]. \quad (14)$$

Из (14) следует, что вносимая погрешность будет меньше, чем погрешность от влияния R_{K_2} , так как уменьшение коэффициента передачи делителя $\left(\frac{R_2}{R_1 + R_2} \right)$ за счет множителя $\left(\frac{R_1 + R_2}{(R_1 + R_2 + R_{K_4})} \right)$ частично компенсируется слагаемым $\left(\frac{R_{K_4}}{(R_1 + R_2 + R_{K_4})} \right)$.

Обобщая приведенный анализ инструментальных погрешностей

рассмотренного измерителя амплитудных параметров сигналов, можно отметить, что эти составляющие целиком определяются элементной базой и зависят от соотношения значений сопротивлений соответствующих элементов устройств. Следовательно, минимальные погрешности, будут при применении высокоомных резисторов в делителе напряжения, при достаточном большом входном сопротивлении преобразователя напряжения и малых сопротивлениях ключей и буферного усилителя.

Предложенный подход минимизации погрешностей измерения на основе структурного моделирования измерителя амплитудных параметров сигналов плодотворен не только при оценки аналитических параметров, но также при динамических измерениях, например, нелинейности амплитудных характеристик устройств переменного тока [6].

Список литературы

1. Афонский А.А., Дьяконов В.П. Измерительные приборы и массовые электронные измерения. М.: Солон-Пресс. 2007. 544 с.
2. Григорьян Р.Л., Скрипник Ю.А., Шалдыкин О.К. Анализаторы характеристик радиоэлектронных устройств. – Киев: Техніка, 1981. – 248 с.
3. Кушнир Ф.В., Савченко В.Г., Верник С.М. Измерения в технике связи. М.: Связь, 1976, 332 с.
4. Григорьян Р.Л., Глазков Л.А., Скрипник Ю.А., Маслов Н.В. Устройство для определения фазочастотных погрешностей широкополосных делителей напряжения. АС СССР №788042. Зарегистрировано: 14.08.1980.
5. Волович Г.И. Схемотехника аналоговых и аналого-цифровых электронных устройств. М.: Додэка-XXI.– 2015. – 528 с.
6. Григорьян Л.Р., Богатов Н.М., Григорьян Р.Л., Сахно М.А. Структурный метод увеличения чувствительности анализаторов амплитудных характеристик четырехполюсников. Проектирование и технология электронных средств №1, 2024, 25 – 30 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАКРОЭВОЛЮЦИИ В ИСКУССТВЕННЫХ БИОСФЕРАХ

Е.Е. Иванко, А.Н. Белоусов

Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского
Уральского отделения Российской академии наук (ИММ УрО РАН)
evgeny.ivanko@gmail.com, belousov_an@uran.ru

Аннотация.

В работе исследуется развитие модельных биотических сообществ, в которых виды выступают в роли среды друг для друга. Каждый эксперимент начинается с появления единственного вида в абиотической среде. Свойства исходного вида, а также размеры абиотической среды, являются независимыми параметрами эксперимента. В ходе имитирующего макроэволюцию «разворачивания» биосферы каждый существующий вид может изменять свою численность (в зависимости от своей текущей приспособленности) и порождать новые виды в результате мутации. По мере «развертывания» модельной биосферы влияние окружающих видов на развитие каждого вида начинает доминировать над влиянием абиотической среды. В серии вычислительных экспериментов мы изучаем связь между «фенотипом» начального вида и распределением численности видов по различным «фенотипическим признакам» в конце цикла развития модельного сообщества.

Введение

Взаимодействующие виды в биологических сообществах создают тесно связанные системы, в которых они оказывают взаимное влияние как на абиотическую среду, так и друг на друга. Влияния биологических видов на абиотическую среду многофакторно, например, изменение химического состава воздуха, воды и почвы за счет продуктов метаболизма; растения влияют на циркуляцию воды, стабильность почвы и инсоляцию; животные прокладывают тропы, строят норы, плотины или гнезда [1]. Биотическая среда вида в сообществе может проявляться в различных формах межвидовых взаимодействий, включая конкуренцию за ресурсы (например, коралловые

химические войны), участие в пищевых цепях (например, хищник-жертва, паразиты-хозяева, редуценты-мертвая материя), взаимное сотрудничество, такое как опыление, «чистка за еду» (рыбы-лоцманы и акулы) или поддержка пищеварения (лактобактерии в кишечнике человека).

Процесс, посредством которого организмы модифицируют свою окружающую среду и влияют на окружающую среду друг друга, называется построением ниш (niche construction) [1]. Несмотря на разногласия по этой теме, существует множество исследований, рассматривающих строительство ниш [2,3] как универсальное явление, сопровождающее и во многом определяющее развитие сообществ [4-8].

Относительно недавняя работа [5] расширяет концепцию построения ниш, выходя за пределы физических изменений, которые виды вносят в окружающую среду. Введенные понятия конститутивного и реляционного построения ниш расширяют возможности теоретического описания сложных взаимодействий в совместно развивающихся биологических сообществах.

Другой способ описания возрастающей сложности и разнообразия сообществ предлагает теория диффузной или гильдиевой коэволюции (guild coevolution), в рамках которой черты каждого вида в группе развиваются в ответ на черты других видов группы [9]. В [5] предлагается рассматривать эту множественную коэволюцию как частный случай построения ниш на основе взаимного влияния видов.

Взаимосвязанные процессы построения ниш, осуществляемые совместно развивающимися видами, объединяются в интегрированный процесс «адаптивного ландшафтного строительства» (adaptive landscape construction) в масштабе всего сообщества [10]. В ходе этого процесса сообщество формирует для себя окружающую среду и эволюционные возможности.

В настоящей работе исследуется развитие модельных биотических сообществ, в которых виды выступают в роли среды обитания друг для друга. Каждый эксперимент начинается с появления единственного вида в абиотической среде. Свойства этого вида (вместе с размерами абиотической

среды) являются параметрами эксперимента. В ходе последующего макроэволюционного «развертывания» каждый вид может изменять свою численность (в соответствии с текущей приспособленностью) и порождать новые виды (в результате мутаций). По мере «развертывания» модельной биосферы влияние окружающих видов на развитие каждого вида начинает доминировать над влиянием абиотической среды. Подчиняясь описанной механике, искусственные биотические сообщества демонстрируют «адаптивное расхождение» (adaptive radiation) от одного вида к сложным сетям, в которых виды совместно развиваются в адаптивных ландшафтах, созданных ими самими.

Настоящая работа посвящена изучению данного процесса, в частности, рассматривается связь между «фенотипом» начального вида и распределением численности видов по различным «фенотипическим признакам» в конце цикла развития модельного сообщества.

Модель

Модельная биосфера состоит из видов, равномерно «растворенных» в доступном объеме благоприятной для этих видов абиотической среды. Время в модели дискретно, геометрия отсутствует, т.е. взаимодействия между видами передаются мгновенно, во всем объеме и без потерь, так что далее численность видов и их концентрацию мы будем считать синонимами. В начальной фазе эксперимента задан один вид S_0 минимальной численности, принимаемой за 1 («зарождение жизни»). В зависимости от «благоприятности условий», определяемой совокупным воздействием абиотической среды и влиянием других видов, каждый вид на каждой итерации изменяет свою численность. Кроме изменения численности вид может порождать новые виды с вероятностью, пропорциональной численности данного вида. Описанная «биосфера» растет, пока не достигает либо ограничения на допустимую совокупную численность (максимальная вместимость окружающей среды, задается параметром эксперимента), либо 5000 видов (жесткое техническое ограничение). По мере развития биосферы и роста численности составляющих ее видов окружающая среда для каждого вида все в большей степени определяется влияниями других

видов, изначальное положительное влияние абиотической среды отходит на второй план.

Формализуем сказанное. Единственным параметром абиотической среды является ее объем A (в экспериментах рассматриваются значения 10^i , где $i \in \overline{4,8}$).

В случае, если суммарная численность видов биосферы превышает величину A , эксперимент останавливается. Каждый из видов S обладает следующими свойствами («фенотипические признаки»), остающимися неизменными на протяжении всего жизненного цикла вида:

1) Набор параметров биотического влияния (BIP), показывающих насколько благоприятно присутствие данного вида для каждого из других видов в сообществе (включая сам вид S). Влияние вида S на вид C задается функцией $BIP(S,C)$, принимающей значения в отрезке $[-1,1]$. Влияние вида на себя всегда негативно, что отражает как внутривидовую конкуренцию за ресурсы, так и негативное влияние на вид повышения концентрации отходов его собственной жизнедеятельности (т.е. $BIP(S,S) < 0$ для всякого вида S).

2) Параметр биотического влияния (AIP), показывающий, насколько благоприятна абиотическая среда для данного вида. В наших экспериментах предполагается, что среда всегда благоприятна, т.е. для всякого вида S признак $AIP(S)$ принимает значения от 0 до 1.

3) Диапазон мутаций (MR) представляет собой максимально допустимое различие между видом S и его потомковыми видами (можно трактовать MR как различие генотипов, хотя в явном виде генотип в модель не вводится). Фактическое различие при конкретном ветвлении (появлении нового вида) выбирается равновероятно из интервала $[0, MR]$ и определяет отличие фенотипических признаков у потомков S от аналогичных признаков у S (см. формулу (4)). В экспериментах рассматриваются значения MR от 0.01 до 0.11.

4) Скорость жизни (SoL), показывающая способность вида превращать полученную энергию в рост численности. Этот параметр отвечает за регуляцию того, насколько быстро численность вида реагирует на изменения

благоприятности среды обитания. Данный параметр принимает значения от 1.1 до 3.1.

5) Скорость видообразования (SoS), контролирующая частоту событий видообразования. Количество событий видообразования на одной итерации варьируется от 1 до 10^4 .

6) Набор «генотип-фенотипических связей» (GPC), для каждого конкретного предка S_A и каждого конкретного фенотипического признака F (один из BIP , AIP , MR , SoL или SoS) контролирует степень влияния «генетического различия» между S_A и его потомком S_D на различие между $F(S_A)$ и $F(S_D)$ (напомним, что в модели явно не вводятся понятия, связанные с генотипом; указанное «генетическое расстояние» рассчитывается с помощью $MR(S_A)$, см. (4)). Для стартового вида и всех признаков F стартовая величина $GPC(S_0, F)$ выбирается равновероятно от 0 до 1, для последующих видов $GPC(S, F)$ остается внутри $[0, 1]$, варьируясь при наследовании также как и остальные фенотипические признаки, с той лишь разницей, что во избежание порочного круга $GPC(S, GPC(S, F))$ всегда равно 0.5.

Численность каждого вида S на i -той итерации меняется следующим образом:

$$A_{i+1}(S) = A_i(S) \times SoL(S)^{\left\{AIP(S) + \sum_{C \in BC} \frac{A_i(C) \times BIP(C, S)}{A}\right\}} \quad (1)$$

Число попыток видообразования, происходящих внутри вида S на i -той итерации:

$$N_i = \frac{SoS(S) \times A_i(S)}{A} \quad (2)$$

В начале развития в силу малой численности рост биосферы практически незаметен, на протяжении большого числа итераций в биосфере «почти ничего не происходит». В конце же эксперимента, наоборот, рост нередко носит взрывной характер. И тот и другой этап неудобны для наблюдения. Избежать

этого неудобства можно, измеряя внутреннее время системы в событиях видообразования. Тогда в начале развития биосферы время ускоряется, позволяя пропускать длительные периоды «разгона» модели (при малом $A_i(S)/A$ в (2)), а в конце – замедляется (при высоком $A_i(S)/A$), позволяя наблюдать детали взрывообразного роста.

Пусть M_i – общее число событий видообразования, предполагавшихся на i -той итерации в силу (2)

$$M_i = \sum_{S \in BC} N_i(S).$$

Выберем единственный вид, порождающий на данной итерации новый вид, случайным образом согласно распределению $p\{S\} = N_i(S)/M_i$. Скорректируем изменение численности каждого вида пропорционально изменению числа событий видообразования (было M_i , стало 1):

$$A'_{i+1}(S) = A_i(S) + \frac{A_{i+1}(S) - A_i(S)}{M_i} = A_i(S) \times \left(1 + \frac{SoL(S)^{[...]} }{M_i} \right). \quad (3)$$

Характеристики фенотипа порождаемого вида S_d наследуются от предкового вида S_a следующим образом:

$$F(S_d) = F(S_a) + R \times (F_{max} - F_{min}) \times GPC(S_a, F), \quad (4)$$

где F – один из признаков AIP , BIP , MR , SoL , SoS ; R – случайная величина, равномерно распределенная на отрезке $[-MR(S_a), +MR(S_a)]$. В случае, если величина $F(S_d)$, получаемая в результате (4), выходит за пределы интервала $[F_{min}, F_{max}]$, в качестве $F(S_d)$ выбирается ближайшая граница этого интервала.

Эксперимент и результаты

Для того, чтобы проследить зависимость состояния модельной биосферы в конце эксперимента от стартовых параметров (фактически – от набора фенотипических признаков стартового вида S_0) поочередно для каждого фенотипического признака F из набора (AIP , BIP , MR , SoL , SoS) фиксируется одно из его значений x и проводится 1000 повторений эксперимента, в которых $F(S_0) = x$ (например, $AIP(S_0) = 0.1$), а значения остальных фенотипических признаков S_0 , а также значение \mathbb{A} , выбираются равновероятно из соответствующих интервалов (см. горизонтальные оси на Рис. 1). В конце каждого из экспериментов запоминается распределение численности видов по различным значениям F . Такие распределения, агрегированные по 1000 повторений для фиксированного $F(S_0) = x$, формируют гистограмму, определяемую выбранным признаком F (подпись к осям графика) и значением x этого признака (величина по оси ОУ). Формально каждая гистограмма на Рис. 1 определяется в следующем виде

$$(h_1^F, \dots, h_{k(F)}^F)_{F(S_0)=x},$$

где $k(F)$ – количество интервалов (bins) в дискретном распределении F (для каждого фенотипического признака, подставляемого вместо F , это число свое, см. горизонтальные оси на Рис.1); h_i^F относительная численность видов в биосфере, фенотипический признак F которых в конце эксперимента принимает значение из i -го интервала, суммированная по 1000 повторениям эксперимента при фиксированном $F(S_0) = x$.

Построенное распределение численности видов по фенотипическим признакам демонстрирует интересный феномен: по мере развития биосферы численность аккумулируется в видах с большими значениями фенотипических признаков. Действительно, на гистограммах графиков в Рис.1 самый высокий столбец соответствует естественной и ожидаемой концентрации конечных значений фенотипического признака вблизи его начального значения (т.е. значения u вида S_0). Каждый наибольший столбец гистограммы окружен

столбцами меньшей высоты, соответствующими как более низким, так и более высоким значениям этого признака у новых видов, появившихся в процессе развития биосферы (для наглядности на Рис.1 высоты столбцов гистограмм логарифмированы). Рассеивание вокруг доминирующих столбцов не симметрично: сдвиг в сторону более высоких значений фенотипического признака заметно больше. Другими словами, биосфера имеет тенденцию производить новые виды, которые: а) обладают лучшими способностями к поглощению энергии (*AIP*); б) меньше конкурируют друг с другом (*BIP*); в) порождают потомковые виды, более отличающиеся от них самих, чем они сами отличались от своих предков (*MR*); г) растут быстрее (*SoL*); д) порождают больше видов-потомков (*SoS*).

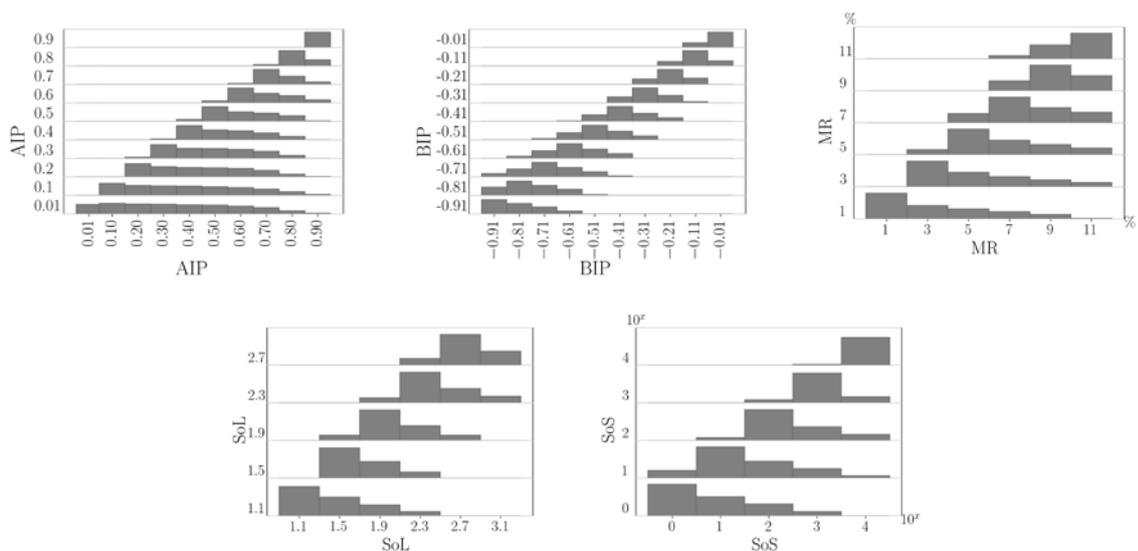


Рис. 1: Зависимость распределений численности видов в конце эксперимента по различным значениям фенотипических признаков от значений этих признаков у стартового вида (значения по вертикальной оси). Высота каждого столбца равна логарифму суммарной численности всех видов, которые в конце эксперимента обладали значением фенотипического признака, попадающим в интервал данного столбца по горизонтальной оси. Суммирование проводится как по всем 1000 экспериментам, в которых значение соответствующего фенотипического

признака стартового вида равно значению для данного столбца по оси ОУ, так и по всем подходящим видам внутри каждой из этих 1000 биосфер

Интересно, что развитие мутуализма на межвидовом уровне (повышение BIP выше 0) можно объяснить одним лишь уменьшением вредоносности вида по отношению к себе (поскольку $BIP(S,C)$ может оказывать непосредственное влияние на качество среды для S только если $C = S$). Данный эффект может быть естественным образом подкреплён отбором на уровне макроэволюции, поскольку как правило вид является частью своей собственной среды обитания. Рассмотрим сказанное подробнее. Для каждого вида S увеличение фенотипического признака $BIP(S,S)$ благоприятно для S (если S становится менее вредным для самого себя, его среда улучшается). Если некий новый вид S имеет больший $BIP(S,S)$ по сравнению со средним $BIP(X,X)$ по биосфере, то все потомки S (обозначим их как S_1, \dots, S_k) будут в среднем менее неблагоприятны друг для друга в сравнении со средней попарной неблагоприятностью видов по всей биосфере (т.е. в среднем признак $BIP(S_i, S_j), i, j \in 1 \dots k$ увеличен). Это означает, что: 1) сам вид S находится в несколько более благоприятных условиях, что несколько увеличивает его численность в силу сдвига на Рис.1(BIP); и 2) все потомки S (немного более многочисленные и обильные благодаря предыдущему пункту) находятся в ещё более благоприятных условиях (поскольку в среднем менее враждебны друг другу).

Список литературы

1. Kevin Neville Laland, Blake Matthews, and Marcus W. Feldman. An introduction to niche construction theory. *Evolutionary Ecology*, 30(2):191–202, April 2016.
2. Thomas C. Scott-Phillips, Kevin N. Laland, David M. Shuker, Thomas E. Dickins, and Stuart A. West. The niche construction perspective: A critical appraisal. *Evolution*, 68(5):1231–1243, 2014.

3. Tobias Uller and Heikki Helanterä. Niche Construction and Conceptual Change in Evolutionary Biology. *The British Journal for the Philosophy of Science*, 70(2):351-375, 08 2017.
4. Douglas H. Erwin. Macroevolution of ecosystem engineering, niche construction and diversity. *Trends in Ecology & Evolution*, 23(6):304 – 310, 2008.
5. Blake Matthews, Luc De Meester, Clive G. Jones, Bas W. Ibelings, Tjeerd J. Bouma, Visa Nuutinen, Johan van de Koppel, and John Odling-Smee. Under niche construction: an operational bridge between ecology, evolution, and ecosystem science. *Ecological Monographs*, 84(2):245–263, 2014.
6. Claudia C. Buser, Richard D. Newcomb, Anne C. Gaskett, and Matthew R. Goddard. Niche construction initiates the evolution of mutualistic interactions. *Ecology Letters*, 17(10):1257–1264, 2014.
7. Kevin Laland, John Odling-Smee, and John Endler. Niche construction, sources of selection and trait coevolution. *Interface Focus*, 7:20160147, 10 2017.
8. Bendik Hellem Aaby and Grant Ramsey. Three Kinds of Niche Construction. *The British Journal for the Philosophy of Science*, 12 2019. axz054.
9. Jon R. Haloin and Sharon Y. Strauss. Interplay between ecological communities and evolution. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 1133(1):87–125, 2008.
10. Douglas H. Erwin. Novelty and innovation in the history of life. *Current Biology*, 25(19): R930 – R940, 2015.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ УЛЬТРАХОЛОДНОЙ НАТРИЕВОЙ ПЛАЗМЫ, СОЗДАННОЙ В ПРОЦЕССЕ ОДНО- И ДВУХ-СТУПЕНЧАТОЙ ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМОВ

Н.И. Косарев

Сибирский федеральный университет,

Институт цветных металлов, *kosarev_nikolai@mail.ru*

Для исследования кинетики формирования натриевой плазмы была построена ударно-радиационную модель на основе скоростных уравнений баланса населенностей многоуровневых атомов натрия, электрон-атомные столкновения, радиационные процессы, фото- и трехчастичную рекомбинацию. Фотоионизация атомов моделировалась согласно двум схемам. Схема 1 использует двух-ступенчатый процесс. Сначала на первом шаге лазер накачки на длине волны $\lambda_1 = 0.5896 \text{ мкм}$ возбуждает уровень $3^2P_{1/2}$ в атоме натрия. На этом переходе учитывался перенос излучения. На втором шаге ионизирующий лазер с уровня $3^2P_{1/2}$ ионизирует атомы. Варьируя отстройку его длины волны от пороговой ($\lambda_{th} = 408.8 \text{ нм}$) можно было моделировать появление электронов при ультрахолодных начальных температурах $\geq 0.1 \text{ К}$. Для схемы 2 построена модель одно-ступенчатой фотоионизации из основного состояния атома натрия. Лазер накачки в этой схеме только контролирует температуру электронов и сверхупругий нагрев электронов при тушении ими возбужденного $3^2P_{1/2}$ уровня, как было показано в работе [1] при моделирование кинетики барьерной фотоплазмы. Для моделирования кинетики ионизации атомов натрия в двухступенчатом процессе необходимо рассчитать сечение фотоионизации, соответствующего чрезвычайно малой начальной температуре фотоэлектронов $T_e \geq 0.1 \text{ К}$ ($8.6 \times 10^{-6} \text{ эВ}$). Сечение фотоионизации с уровня $3^2P_{1/2}$, вблизи пороговой длины волны $\lambda_{th} = 0.4088 \text{ мкм}$ рассчитывалось методом квантового дефекта [2] и составило $\sigma^{theor} = 8.2 \times 10^{-18} \text{ см}^2$. На рис. 1 показана многоуровневая модель атома натрия, которая включала 7 уровней, обозначенных на рисунке цифрами от 1 до 7: 1 – основной уровень $3^1S_{1/2}$; 2, 3 – возбужденные уровни $3^2P_{1/2,3/2}$;

высоколежащие возбужденные уровни 4–7, 4S, 3D, 4P, 5S, ионизационное состояние. Пунктирные стрелки указывают направления спонтанного распада состояний. Рисунок также показывает лазер накачки на длине волны $\lambda_1 = 0.5896 \text{ мкм}$ и ионизирующие лазеры с длинами волн меньше пороговой $\lambda_{th} = 0.4088 \text{ мкм}$, для схемы 1 и $\lambda_{th} = 0.2410 \text{ мкм}$ для схемы 2. Начальная энергия фотоэлектронов ε_{el} определялась по формуле: $1.24/\lambda_{1,2} = 1.24/\lambda_{th} + \varepsilon_{el}$, где длины волн подставляются в единицах [мкм], а ε_{el} в [эВ]. Скоростные уравнения ударно–радиационного баланса для такой 8–и уровневой модели атома натрия для схемы 1 имели следующий вид:

$$dN_1/dt = -P_{12}N_1 + P_{21}N_2 + \sum_{i=2}^7 A_{i1}N_i + \sum_{i \neq 1}^7 (K_{i1}N_i - K_{1i}N_1)N_e + \beta_{th}N_e^2 - K_{1c}N_1N_e + \beta_{ph}N_e^2 \quad (1)$$

$$dN_2/dt = P_{12}N_1 - P_{21}N_2 + \sum_{i=3}^7 A_{i2}N_i - A_{21}N_2 + \sum_{i \neq 2}^7 (K_{i2}N_i - K_{2i}N_2)N_e - K_{2c}N_2N_e - K_{2c}N_2 - W_{2c}^{(ph)}N_2 \quad (2)$$

$$dN_m/dt = \sum_{i>m} A_{im}N_i - \sum_{i<m} A_{mi}N_m + \sum_{i \neq m} (K_{im}N_i - K_{mi}N_m)N_e - K_{mc}N_mN_e \quad (3)$$

$m = 3, 4, 5, 6, 7$

$$dN_e/dt = \sum_{i=1}^7 (K_{ic}N_iN_e - \beta_{th}N_e^2 - \beta_{ph}N_e^2) + W_{2c}^{(ph)}N_2. \quad (4)$$

В уравнениях (1) – (4) использованы следующие обозначения:

N_i - плотность населенности атомов на уровне i , N_e – плотность электронов; P_{12} и P_{21} – вероятности радиационного фотовозбуждения основного и фототушения возбужденного уровней, $P_{12} = B_{12} \cdot \bar{J}(r,t)$; $P_{21} = B_{21} \cdot \bar{J}(r,t) + A_{21}$, в которых B_{12} , B_{21} и A_{21} - коэффициенты Эйнштейна для вероятностей вынужденного возбуждения, тушения и спонтанного распада возбужденного уровня, A_{im} – представляют собой коэффициенты Эйнштейна спонтанного распада остальных состояний $i > 2$; $\bar{J}(r,t)$ представляет собой среднюю по телесным углам и частоте интенсивность излучения. Геометрия газового объема моделировалась в форме 3D цилиндра, а метод расчета $\bar{J}(r,t)$ для цилиндрической геометрии

соответствовал работам [1, 3-5]; K_{mi} и K_{im} [$\text{см}^3\text{с}^{-1}$], – коэффициенты реакций возбуждения и тушения состояний электронным ударом; K_{mc} , [$\text{см}^3\text{с}^{-1}$], – коэффициент ионизации атомов электронным ударом из состояния m в континуум с. $W_{2c}^{(ph)}$ [с^{-1}], – вероятность фотоионизации с уровней 2; β_{th} [$\text{см}^6\text{с}^{-1}$] – коэффициент реакции трехчастичной рекомбинации, β_{ph} , [см^{-3}] – коэффициент фоторекомбинации.

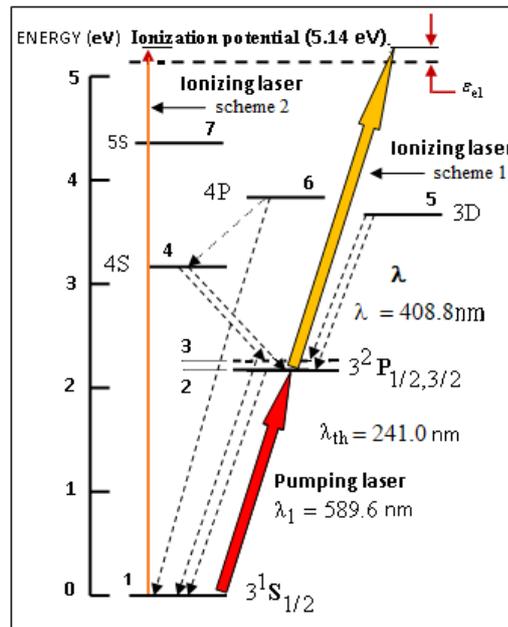


Рис. 1. Диаграмма уровней энергии атома Na.

Начальные условия для уравнений (1)-(4) в момент времени $t = 0$ имели следующий вид:

$$N_1(r,0) = N_0, \quad N_m(r,0) = 0, \quad m = 2,3,\dots,7,$$

где N_0 – начальная плотность атомов натрия. Коэффициенты реакций, учитываемых в модели, их формульные выражения и методы расчета соответствуют работам [3-5].

Скоростные уравнения баланса (1)–(4) дополнялись уравнением для температуры T_e [эВ] электронов, которое учитывало изменение со временем энергии электронов. Это уравнение имело следующий вид:

$$dT_e/dt = 2/3 \sum_{i>k}^7 (K_{ik} N_i - K_{ki} N_k) \Delta E_{ki} - \sum_{i=1}^7 (2/3 E_i + T_e) (K_{ic} N_i) +, \quad (5)$$

$$(2/3 E_1 + T_e) (\beta_{th} N_e) - 2/3 H_{ea} \sum_{i=1}^n N_i - 2/3 H_{ei} N_e,$$

в котором введены следующие обозначения: E_i - энергия ионизации с уровней i атома; ΔE_{ki} [эВ]- разность энергий между уровнями k и i ; H_{ea} , H_{ei} скорости передачи энергии при упругих процессах электронов с атомами и ионами [4]. Начальные условия для уравнения 5 имели вид:

$$T_e(r,0) = \varepsilon_{el},$$

где ε_{el} - начальная энергия электронов. Для схемы 2 вероятность фотоионизации $W_{2c}^{(ph)}$ во втором уравнении системы (1)–(4) переходило в первое уравнение в вероятность $W_{1c}^{(ph)}$, а в уравнении (4) слагаемое $W_{2c}^{(ph)}$ соответственно, менялось на $W_{1c}^{(ph)}$. В остальном, структура уравнений (1)–(5) для схемы фотоионизации 2 не отличалась от схемы 1.

Исследуем кинетику двухступенчатой ионизации для оптически тонкой среды в схеме 1. Рис.2 показывает зависимость от времени нормализованные плотности населенности атомов натрия в основном состоянии $n_1 = N_1 / N_0$ (кривая 1) и на возбужденном уровне $n_2 = N_2 / N_0$ (кривая 2). Вспомогательная (правая ось) показывает нормализованную плотность электронов $n_e = N_e / N_0$ (кривая 3) и динамику температуры электронов (кривая 4). Начало действия лазера накачки и ионизирующего лазера одновременно, а их длительности совпадали ($\tau_{p1} = \tau_{p2} = 5 \text{ нс}$); $N_0 = 2.0 \times 10^{10} \text{ см}^{-3}$, $T_a = 60 \text{ К}$. Начальная оптическая толщина паров натрия вдоль диаметра цилиндра составляла $\tau_0 = 0.3$. Интенсивности лазера накачки составляла $J_{01} = 1.5 \times 10^2$, а ионизирующего $J_{02} = 1.01 \times 10^6 \text{ Вт/см}^2$. Для оптически тонкой среды поглощение лазерного излучения в линии $3^1S_{1/2} \leftrightarrow 3^2P_{1/2}$ мало и кинетика ионизации развивается однородно по поглощающему слою паров натрия. При фотовозбуждении резонансной линии плотность населенности атомов в основном состоянии падает (кривая 1) и, соответственно, возрастает плотность атомов на уровне $^2P_{1/2}$ (кривая 2) за время

$t \leq 5 \text{ нс}$. Действие второго лазера с энергией кванта превышающей ионизационный порог, приводит к ионизации атомов, кривая 3. На временах, когда действие импульсов уже почти закончилось ($t \approx 100 \text{ нс}$), плотность электронов выходит на постоянное значение $n_e \cong 0.105$. При этом атомы из возбужденного состояния за счет спонтанного распада снова переходят на основной уровень, но стационарное значение величины n_1 уже ≈ 0.9 потому, что примерно 10 % атомов проионизовано в двухступенчатом процессе.

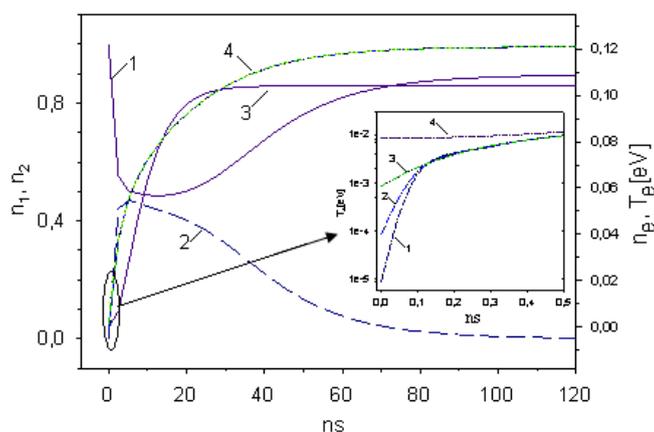


Рис. 2. Кинетика ионизации и сверхупругого нагрева электронов.

Отдельно обратим внимание на кинетику электронной температуры, кривая 4. Так на временах $t \approx 100 \text{ нс}$ энергия электронов уже достигает величины $T_e = 0.1 \text{ эВ}$. Результаты численного моделирования показали, что такое значение электронной температуры не зависит от начальной величины энергии электронов ε_{el} . Моделировалось действие ионизирующего лазера при различных отстройках лазерного фотона от энергии ионизации. Так вставка в рис. 2 дает электронную энергию на временах воздействия двумя лазерами $\approx 0.5 \text{ нс}$ при начальных энергиях электронов $\varepsilon_{el} = 8.6 \times 10^{-6}; 8.6 \times 10^{-5}; 8.6 \times 10^{-4}; 8.6 \times 10^{-3} \text{ эВ}$ (кривые 1–4). При таких начальных значениях температуры, за время $t \approx 0.5 \text{ нс}$ все кривые сходятся к величине $T_e = 0.01 \text{ эВ}$, а в дальнейшем, увеличение электронной энергии происходит одинаковым темпом для всех кривых 1–4. Рост температуры для кривой 1 соответствующей начальной энергии $\varepsilon_{el} = 8.6 \times 10^{-6} \text{ эВ}$, а конечной

0.12 эВ составил более чем 5 порядков. Следовательно, за время действия лазеров накачки и ионизирующего лазера происходит нагревание электронов в сверхупругих тушащих столкновениях.

Результаты моделирования показали, что натриевая плазма, полученная в двухступенчатом процессе, будет рекомбинировать за счет фоторекомбинации. Время рекомбинации зависит от начальной плотности атомов. Но при любой величине N_0 время фоторекомбинации всегда меньше времени трехчастичной рекомбинации. Следовательно, фоторекомбинация является основным механизмом релаксации натриевой плазмы, полученной именно в двухступенчатом процессе. Поэтому следует рассмотреть однофотонную ионизацию натрия.

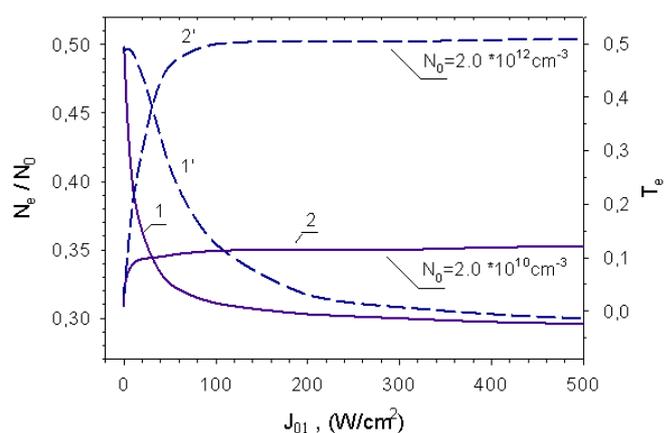


Рис.3. Зависимости нормализованной электронной плотности, кривые 1, 1' и электронной температуры, кривые 2,2' от плотности мощности лазера накачки. Температура электронов отображена по вспомогательной (правой) оси.

Далее представлены результаты моделирования процесса формирования натриевой плазмы через однофотонную ионизацию (схема 2). В этом случае излучение ионизирующего лазера настраивается на длину волны близкую к порогу ионизации $\lambda = 0.241 \mu\text{м}$ из основного состояния атома натрия. Начальная энергия электронов моделировалась величиной отстройки ионизирующего лазера от ионизационного порога и составляла величину $\varepsilon_{el} = 8.6 \times 10^{-4} \text{ эВ}$. В этой схеме лазер накачки действует независимо от ионизирующего лазера. Таким

путем можно изучить, как температура электронов зависит от интенсивности лазера накачки. Длительности импульсов выбирались, как и для схемы 1: $\tau_{p1} = \tau_{p2} = 5 \text{ нс}$, $T_a = 60.0 \text{ К}$. Сечение фотоионизации рассчитывалось по формуле [6]. Плотность мощности ионизирующего лазера бралась $J_{02} = 5.1 \cdot 10^6 \text{ Вт/см}^2$. На рис.3 показаны зависимости электронной плотности и электронной температуры от плотности мощности лазера накачки. Сплошные кривые 1,2 получены при начальной концентрации атомов натрия $N_0 = 2.0 \times 10^{10} \text{ см}^{-3}$, которой соответствует оптическая толщина среды $\tau_0 = 0.3$. Пунктирные кривые 1', 2' соответствуют $N_0 = 2.0 \times 10^{12} \text{ см}^{-3}$, при которой $\tau_0 = 30$. При нулевой интенсивности лазера накачки J_{01} ионизация максимальна и составляет $N_e / N_0 = 0.5$, сплошная кривая 1. Как только интенсивность лазера накачки увеличивается до значения $\approx 20 \text{ Вт/см}^2$, степень ионизации резко уменьшается и уже составляет примерно величину $N_e / N_0 = 0.37$. Это объясняется накачкой возбужденного уровня лазерным излучением, при которой плотность населенности основного уровня падает. Как следствие уменьшения населенности основного уровня, происходит уменьшение количества проионизованных атомов. Одновременно с ростом интенсивности J_{01} происходит увеличение температуры электронов, значение которой отображено по вспомогательной (правой) оси ординат. Так при интенсивности накачки $J_{01} = 20 \text{ Вт/см}^2$, температура T_e от начальной величины $8.6 \times 10^{-4} \text{ эВ}$ возросла до значения $T_e \approx 0.1 \text{ эВ}$. Электронная температура возросла более чем в 100 раз. При дальнейшем росте интенсивности лазера накачки, начиная примерно от $J_{01} \geq 100 \text{ Вт/см}^2$, значительного уменьшения плотности электронов не происходит, так же как и не происходит дальнейшего заметного увеличения электронной температуры. Это объясняется тем фактом, что с ростом интенсивности J_{01} реализуется режим близкий к условию насыщения резонансной линии. В таком режиме дальнейшее увеличение интенсивности J_{01} уже не приводит к заметному изменению в заселенности возбужденного уровня. Эта заселенность, согласно нашему предположению, и играет первостепенную

роль в сверхупругом нагреве электронов при тушении ими возбужденного состояния.

Пунктирные кривые 1', 2' на рис. 3 построены для оптически плотной среды. Как и для предыдущего случая в отсутствии лазера накачки степень ионизации составляет величину $N_e/N_0 = 0.5$. С ростом интенсивности накачки происходит уменьшение плотности электронов из-за уменьшения населенности основного состояния атома натрия. Но снижение плотности электронов происходит более медленно, чем в оптически тонком случае. Это вызвано поглощением лазерного излучения, когда режим близкий к насыщению линии реализуется уже для больших значений J_{01} . При этом почти стационарное значение N_e/N_0 равное ≈ 0.3 достигается только при $J_{01} \geq 450 \text{ W/cm}^2$. Но рост электронной температуры теперь от начальной её величины происходит до значений $T_e = 0.52 \text{ эВ}$, пунктирная кривая 2'. С ростом начальной плотности атомов на два порядка, рост электронной температуры по сравнению с предыдущим случаем (кривая 2) составил более чем в 4 раза. Таким образом, результаты моделирования показали, что чем больше населенность возбужденного уровня, тем больше происходит нагревание электронов при одноступенчатой фотоионизации атомов из основного состояния. Следовательно, таким важным параметром плазмы, как электронная температура, можно управлять, меняя интенсивность лазера накачки. Электронная температура также будет влиять на рекомбинацию плазмы, полученной в однофотонном процессе. Через интенсивность лазера накачки резонансной линии можно управлять процессом рекомбинации плазмы.

В представленной работе построена ударно-радиационная модель кинетики натриевой фотоплазмы и рекомбинации ионов натрия. Модель использует две схемы ионизации атомов. Первая схема реализована, как двухступенчатый процесс. На первой ступени лазер накачки на длине волны $\lambda_1 = 0.5896 \text{ мкм}$ возбуждает верхнее состояние резонансной линии в атоме натрия $3^1S_{1/2} \leftrightarrow 3^2P_{1/2}$. Модель учитывает перенос резонансного излучения в этой линии, в

которой пары натрия являются оптически плотными. На второй ступени ионизирующий лазер с энергией фотона, превышающий порог ионизации с уровня $3^2P_{1/2}$, фотоионизует атомы. На этом уровне происходит сверхупругий нагрев электронов. В схеме 2 лазер накачки уже не связан с ионизирующим лазером и воздействует на резонансный переход независимо от последнего. Его роль сводится лишь к управлению температурой электронов. Задавая малую интенсивность лазера накачки можно добиться незначительного увеличения температуры электронов. В результате такого варьирования интенсивностью, можно контролировать температуру электронов так, что рекомбинация фотоплазмы будет происходить в трехчастичных столкновениях.

Список литературы

1. Kosarev N.I. Three-body recombination of ultracold barium plasma created by two-step photoionization of atoms through an excited $6s6p^1P_1$ level / N.I. Kosarev // Phys. Plasmas. – 2022. – V.29, P.123509-1.
2. Sobel'man I.I. An introduction to the theory of atomic spectra / I.I. Sobel'man. - Pergamon press, New York, 1972. – 605 p.
3. Kosarev N.I. Resonance fluorescence of laser-driven barium plasma / N.I. Kosarev // Appl. Opt. - 2021. – V.60 No.23, P.6850.
1. 4. Kosarev N.I. Laser resonant ionization of sodium atoms under radiation transfer conditions / N.I. Kosarev // Mat. Model. – 2005. – V.17, No.5, P.105.
2. 5. Kosarev N.I. Resonance laser-induced ionization of sodium vapour taking radiative transfer into account / N.I. Kosarev, N.Y. Shaparev // Quantum Electron. – 2006. – V.36, No.4, P.369.
6. Zel'dovich Ya. B., Raizer Yu.P. Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena / Ya. B. Zel'dovich, Yu. P. Raizer. - New York: DOVER PUBLICATIONS, INC. Mineola, 2002. - 916 p.

ФЛУКТУАЦИИ ПРИ ТУРБУЛЕНТНОСТИ В РАМКАХ ПОДХОДА

ЛАНДАУ

В.Н.Удодов

Хакасский государственный университет им. Н.Ф.Катанова,
Инженерно-технологический институт, каф. промышленного, гражданского
строительства и техносферной безопасности, каф. программного обеспечения
вычислительной техники и автоматизированных систем, *udodov@khsu.ru*

1. Введение

В работе Л.Д. Ландау «К проблеме турбулентности» (1944 г.) рассмотрен переход от ламинарного движения к турбулентному для однородной среды при увеличении числа Рейнольдса [1-3]. В [4, 5] развиты идеи Ландау для однородной и неоднородной турбулентности. В данной работе в рамках общей теории фазовых переходов (ТФП) Ландау и скейлинговой ТФП [6-12] рассмотрены флуктуации при турбулентности.

2. Элементы теории турбулентности Л.Д. Ландау

Введем обозначения [1-3]. Существует критическое число Рейнольдса [3]

$$R = \frac{\rho V L}{\mu} = \frac{\rho V_C L}{\mu} = R_C . \quad (1)$$

Здесь ρ – плотность среды, V – скорость жидкости или газа, L – характерный линейный размер, μ – коэффициент динамической вязкости, V_C – критическая скорость. При

$$R < R_C \quad (2)$$

ламинарное движение устойчиво, в обратном случае ламинарное движение не устойчиво и появляются периодические движения с комплексными частотами [3]

$$\omega = \omega_1 + i\gamma_1 , \quad (3)$$

где γ_1 – мнимая часть частоты, причем она отрицательна при малых числах Рейнольдса. При $R = R_C$ появляется одна частота, мнимая часть которой обращается в нуль [1-3]. При $R > R_C$ у этой частоты $\gamma_1 > 0$. Возмущение

скорости (отклонение от ламинарного движения), соответствующее этой частоте, имеет вид [3]:

$$V_1 = A(t) f(\vec{r}) , \quad (4)$$

где f – некоторая комплексная функция координат, а комплексная амплитуда возмущения скорости для малых времен равна [3]

$$A(t) = const * e^{\gamma_1 t} e^{-i\omega_1 t} . \quad (5)$$

Производная по времени от квадрата модуля амплитуды ($|A|^2 = A \cdot A^* = x$, звездочка обозначает комплексное сопряжение) равна

$$\frac{d|A|^2}{dt} = \frac{dx}{dt} = 2\gamma_1 x . \quad (6)$$

Это начало разложения в ряд по x [1-4]. В простейшем случае разложение имеет вид [3]

$$\frac{dx}{dt} = 2\gamma_1 x - \alpha_0 x^2 , \quad (7)$$

где α_0 – постоянная Ландау. Сначала считаем $\alpha_0 > 0$. В этом случае в пределе бесконечного времени x стремится к [3]

$$x_{\max} = |A|_{\max}^2 = \frac{2\gamma_1}{\alpha_0} . \quad (8)$$

Величина γ_1 зависит от R , в простейшем приближении имеем [3]

$$\gamma_1 \approx a(R - R_C) . \quad (9)$$

Подставив это в (8), найдем модуль максимальной амплитуды возмущения скорости [3]

$$|A|_{\max} \approx a_1 (R - R_C)^{1/2}, R \geq R_C . \quad (10)$$

В случае $\alpha_0 < 0$ разложение (7) принимает вид [3]

$$\frac{dx}{dt} = 2\gamma_1 x - \alpha_0 x^2 - \alpha_1 x^3 , \quad (11)$$

где α_1 – положительная константа. Подчеркнем, что рассмотренная теория применима лишь к начальной стадии развития турбулентности.

3. Аналогия с теорией ФП

В общей ТФП Ландау есть параметр порядка (ПП) η [4, 6], который равен нулю в одной фазе (неупорядоченная фаза (НФ)) и отличен от нуля в упорядоченной фазе (УФ). В теории турбулентности Ландау комплексная амплитуда возмущения скорости (5) равна нулю для НФ и не равна нулю при турбулентном движении (УФ). Следовательно, в теории турбулентности Ландау ПП – это амплитуда возмущения скорости [4, 5]

$$\eta = A(t) , \quad (12)$$

квадрат модуля которой обозначен здесь за x . Управляющим параметром является число Рейнольдса. Поскольку амплитуда возмущения скорости среды комплексная функция, то ПП для ФП от ламинарного движения к турбулентному является двухкомпонентным [4], так же как в теории сверхпроводимости Гинзбурга-Ландау и в теории сверхтекучести [12]. Если считать, что турбулентность является изотропной [3], как и сверхтекучесть в гелии – 4, то эти два явления принадлежат к одному классу универсальности.

Сначала разберем случай положительной постоянной Ландау. При увеличении числа Рейнольдса R от малых значений сначала ламинарное движение устойчиво, амплитуда возмущения равна нулю, что соответствует НФ. Как только R станет больше R_C , появится ненулевое периодическое возмущение скорости сколько угодно малой амплитуды, которая будет расти по закону (10)

$$|\eta| = |A|_{\max} \approx a_1 (R - R_C)^{1/2} \propto (R - R_C)^\beta, R \geq R_C . \quad (13)$$

Здесь β – критический индекс ПП [6], который в теории турбулентности Ландау равен [4]

$$\beta = 1/2 , \quad (14)$$

что совпадает со значением этого индекса в ТФП Ландау второго рода (2р) [4-6]. Переход от ламинарного движения к турбулентному при увеличении R при $\alpha_0 > 0$ аналогичен ФП 2р, так как при этом состояние меняется плавно, без скачков.

Случай $\alpha_0 < 0$ соответствует ФП первого рода (ФП 1р). Действительно, при увеличении R от малых значений до R'_C движение среды ламинарно (НФ) [4, 5]. В интервале $R_C > R > R'_C$ есть два устойчивых движения: ламинарное и турбулентное, но при медленном увеличении R сначала реализуется ламинарное движение, которое далее скачком перейдет в турбулентное движение (УФ), при этом ПП испытывает конечный скачок. Наличие метастабильного состояния и конечного скачка состояния при ФП характерно для ФП 1р [5].

Возможен промежуточный случай (не рассмотрен в теории турбулентности Л.Д. Ландау), когда $\alpha_0 \equiv 0$ ($\gamma_1 \neq 0$) (см. (11)) [4]

$$\frac{dx}{dt} = 2\gamma_1 x - \alpha_1 x^3 . \quad (15)$$

В стационарном случае производная по времени равна нулю

$$\frac{dx}{dt} = 2\gamma_1 x - \alpha_1 x^3 = 0 . \quad (16)$$

Это уравнение имеет три решения: нулевое, соответствующее НФ, и два корня уравнения [4, 5]

$$2\gamma_1 = \alpha_1 x^2, \quad \alpha_1 > 0 , \quad (17)$$

один из этих корней не имеет физического смысла. Другой корень

$$x = |A|^2 \propto \gamma_1^{1/2} \propto (R - R_C)^{1/2} \quad (18)$$

или

$$|A| = |\eta| \propto (R - R_C)^{1/4} = (R - R_C)^\beta . \quad (19)$$

В этом случае критический индекс ПП равен [4]

$$\beta = 1/4 . \quad (20)$$

Возможен еще один случай, соответствующий критической точке обычной ТФП Ландау (критическая точка ФП 2р или трикритическая точка для равновесных ФП) [4, 6]. В этой точке

$$\gamma_1 = 0, \quad \alpha_0 = 0 . \quad (21)$$

При приближении к трикритической точке γ_1 и постоянная Ландау α_0 зависят от числа Рейнольдса, причем для γ_1 верна формула (9), для α_0 верна аналогичная формула [4, 5]

$$\alpha_0 = 2b(R - R_C) = 2b\tau, \quad b = \text{const} > 0. \quad (22)$$

Для простоты пусть

$$\alpha_1 = +1. \quad (23)$$

Тогда [5]

$$x_{\max} = |A|_{\max}^2 = |\eta|^2 = -\frac{\alpha_0}{2} \pm \left[\frac{\alpha_0^2}{4} + 2\gamma_1 \right]^{1/2}. \quad (24)$$

При $\tau = (R - R_C) \rightarrow 0$

$$|\eta|^2 = -b\tau \pm \tau^{1/2} (2a)^{1/2} \propto \tau^{1/2} \propto \tau^{2\beta}. \quad (25)$$

Следовательно, критический индекс ПП при приближении к трикритической точке переходов (ламинарное движение) \rightarrow (турбулентное движение) равен [4, 5]

$$\beta = +1/4. \quad (26)$$

Возможен теоретически более экзотический случай, когда вместо (9) будет [4, 5]

$$\gamma_1 \approx a(R - R_C)^3 = a\tau^3. \quad (27)$$

Дело в том, что γ_1 должна менять знак в точке ФП, следовательно, τ должна быть в нечетной степени. Теперь [4, 5]

$$|\eta|^2 = -b\tau \pm [b^2\tau^2 + 2a\tau^3]^{1/2} = -b\tau \pm \tau(b^2 + 2a\tau)^{1/2}. \quad (28)$$

Отсюда можно показать, что при приближении к трикритической точке [5]

$$|\eta|^2 \propto \tau^2 \propto \tau^{2\beta} \quad (29)$$

и в этом экзотическом случае трикритической точки для перехода ламинарность \rightarrow турбулентность критический индекс с ПП равен [4, 5]

$$\beta = 1. \quad (30)$$

Теория Ландау-Халатникова для слабо неравновесных состояний основана на формуле [12] (t – время)

$$\frac{d\eta}{dt} = -\gamma_2 \frac{\partial \Omega}{\partial \eta}, \quad \gamma_2 = \text{const} > 0, \quad (31)$$

где Ω является термодинамическим потенциалом. Применим это выражение для нашего случая. Используем (11), причем для краткости упростим обозначения

$$|\eta| \equiv \eta, \quad (32)$$

тогда [5]

$$\frac{d\eta}{dt} = \gamma_1 \eta - \frac{\alpha_0}{2} \eta^3 - \frac{\alpha_1}{2} \eta^5 = -\gamma_2 \frac{\partial \Omega}{\partial \eta}. \quad (33)$$

Отсюда (интегрируя) найдем термодинамический потенциал [4, 5]

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \eta^2 + \frac{\alpha_0}{8\gamma_2} \eta^4 + \frac{\alpha_1}{12\gamma_2} \eta^6. \quad (34)$$

С точностью до обозначений потенциал совпадает с обычным разложением в ТФП Ландау [6]. Для НФ параметр порядка в равновесии равен нулю, считая

$$\eta \rightarrow 0, \quad (35)$$

найдем (см. [12]) для НФ время релаксации ПП [5]

$$\tau_0 = \frac{-1}{\gamma_1} = \frac{-1}{a\tau} \propto \frac{1}{R - R_C}. \quad (36)$$

При приближении к точке непрерывного ФП $R \rightarrow R_C$ и время релаксации стремится к бесконечности (критическое замедление) [12]. При этом вводят кинетический индекс y [12], для турбулентности имеем время релаксации [4, 5]

$$\tau_0 \propto \frac{1}{(R - R_C)^y} = \tau^{-y}, \quad y > 0. \quad (37)$$

Сравнивая с (36), найдем для перехода от ламинарного движения к турбулентному [4, 5]

$$y = 1, \quad (38)$$

что совпадает с обычным значением в ТФП Ландау-Халатникова [12]. Однако в случае экзотической трикритической точки значение кинетического индекса изменится [4, 5]

$$y = 3. \quad (39)$$

Проведенная аналогия является относительной [4, 5]: движение жидкости или газа с трением (вязкостью) – существенно неравновесный процесс, тогда как обычная ТФП Ландау описывает равновесные процессы [6].

4. Неоднородная турбулентность

Для неоднородной турбулентности при учете внешнего поля h разложение плотности термодинамического потенциала имеет вид (аналогично [6])

$$\Omega = -\frac{\gamma_1}{\gamma_2}\eta^2 + \frac{\alpha_0}{8\gamma_2}\eta^4 + \frac{\alpha_1}{12\gamma_2}\eta^6 + g(\nabla\eta)^2 - \eta h, \quad g > 0. \quad (40)$$

В традиционном варианте ТФП Ландау верна формула (9). В нулевом поле плотность потенциала равна

$$\Omega = \Omega_0 + g(\nabla\eta)^2. \quad (41)$$

Полный потенциал найдется как интеграл по объему [6]

$$\Omega_{II} = \int [\Omega_0 + g(\nabla\eta)^2] dV. \quad (42)$$

Далее переходим к Фурье компонентам (\vec{k} – волновой вектор) [6]

$$\eta = \sum_{\vec{k}} \eta_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \quad (43)$$

Интегрируя по объему, найдем (аналогично [6])

$$\Omega_{II} = V \sum_{\vec{k}} \left(gk^2 - \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \right) |\eta_{\vec{k}}|^2. \quad (44)$$

Отсюда найдем дисперсию Фурье компоненты ПП [6] для НФ [4, 5]

$$\langle |\eta_{\vec{k}}|^2 \rangle = \frac{T}{2V \left(gk^2 - \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \right)}. \quad (45)$$

Здесь T – абсолютная температура в энергетических единицах, V – объем системы, k – волновое число [6]

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (46)$$

Теперь рассмотрим релаксацию ПП при учете неоднородности и внешнего поля. Равновесное (независящее от времени) значение ПП определяется минимизацией потенциала [6, 12]

$$\frac{\partial \Omega_{II}}{\partial \eta} = 0. \quad (47)$$

Равновесный параметр порядка обозначим $\langle \eta \rangle$, тогда неравновесный параметр порядка равен

$$\eta(t) \equiv \eta = \langle \eta \rangle + \delta \eta. \quad (48)$$

Для неупорядоченной фазы (НФ) равновесный ПП в теории ФП Ландау равен нулю, тогда

$$\eta = \delta \eta. \quad (49)$$

Для слабо неравновесного состояния линеаризованное уравнение релаксации для НФ (ламинарное движение) имеет вид [12] (h – напряженность внешнего поля)

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -\frac{\eta}{\tau_0} + 2\gamma_2 g \nabla^2 \eta + \gamma_2 h. \quad (50)$$

Здесь ∇^2 – оператор Лапласа. Переходя к Фурье-компонентам для неоднородной системы, получим для НФ близко к точке перехода [12]

$$\frac{\partial \eta_{\vec{k}}}{\partial t} = -\frac{\eta_{\vec{k}}}{\tau_0} - 2\gamma_2 g k^2 \eta_{\vec{k}} + \gamma_2 h = -\frac{\eta_{\vec{k}}}{\tau_{\vec{k}}} + \gamma_2 h. \quad (51)$$

Считая внешнее поле периодическим [12]

$$h \propto \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)) , \quad (52)$$

можно найти обобщенную восприимчивость $\chi(\omega, \vec{k})$ [5]

$$\chi(\omega, \vec{k}) = \frac{\gamma_2}{\frac{1}{\tau_{\vec{k}}} - i\omega}. \quad (53)$$

Смысл внешнего поля для перехода от ламинарного движения к турбулентному нуждается в дополнительном анализе. Это должно быть поле, сопряженное ПП, которым является амплитуда возмущения скорости отклонения от ламинарного движения [5].

При нулевой частоте (однородная система) [5]

$$\chi(0, 0) \equiv \chi = \gamma_2 \tau_0 = \frac{-\gamma_2}{\gamma_1} = \frac{-\gamma_2}{a(R - R_C)} \propto \frac{1}{(R - R_C)^\gamma}. \quad (54)$$

Это обычная статическая восприимчивость, γ – критический индекс восприимчивости [6]. Таким образом, для перехода от ламинарного движения к турбулентному индекс восприимчивости (в рамках ТФП Ландау) [4, 5]

$$\gamma = 1 . \quad (55)$$

Это обычное значение для равновесной ТФП Ландау [6], однако для экзотической трикритической точки [4, 5] индекс восприимчивости изменится

$$\gamma = 3 . \quad (56)$$

Обратное время релаксации найдется как [5, 12]

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}}} = \frac{1}{\tau_0} + 2\gamma_2 g k^2 . \quad (57)$$

Отсюда динамический индекс z для перехода от ламинарного движения к турбулентному равен [5]

$$z = 2 . \quad (58)$$

Это обычное значение этого индекса в теории Ландау-Халатникова [12] (теория среднего поля).

5. Условия применимости теории

Рассмотрим условия применимости ТФП Ландау к явлению перехода от ламинарного (НФ) движения к турбулентному (УФ). ТФП Ландау применима при малых флуктуациях ПП [6]. Для однородной системы при отсутствии внешнего поля равновесное значение ПП для УФ найдется из условия равновесия [6]

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \eta} = 0 . \quad (59)$$

Пренебрегая шестой степенью ПП близко к точке ФП, отсюда найдем для УФ [4, 5]

$$\eta^2 = \frac{4\gamma_1}{\alpha_0} = \frac{4a}{\alpha_0} \tau = \frac{4a}{\alpha_0} (R - R_C) \propto \tau^{2\beta} . \quad (60)$$

Средний квадрат флуктуаций ПП должен быть гораздо меньше этой величины (аналогично [6])

$$\langle |n_0|^2 \rangle = \frac{T\gamma_2}{2V|\gamma_1|} \ll \frac{4|\gamma_1|}{\alpha_0}. \quad (61)$$

Усредним флуктуации ПП по корреляционному объему в трехмерном пространстве [6]

$$\frac{T\gamma_2}{\xi^3|\gamma_1|} \ll \frac{4|\gamma_1|}{\alpha_0}, \quad (62)$$

где ξ – корреляционная длина, для которой в теории равновесных температурных ФП Ландау верна формула [6] (ν – критический индекс корреляционной длины [6])

$$\xi = \left(\frac{g}{a(T - T_C)} \right)^{1/2} = \left(\frac{g}{a(T - T_C)} \right)^\nu. \quad (63)$$

Для нашего неравновесного случая выражение приобретает вид [4, 5]

$$\xi = \left(\frac{g\gamma_2}{|\gamma_1|} \right)^{1/2} = \left(\frac{g\gamma_2}{a|R - R_C|} \right)^{1/2} = \left(\frac{g\gamma_2}{a\tau} \right)^{1/2} = \left(\frac{g\gamma_2}{a\tau} \right)^\nu. \quad (64)$$

Отсюда найдем условие применимости теории турбулентности Ландау для ФП 2р.

$$a\tau = a|R - R_C| \gg \frac{T^2\alpha_0^2}{4^2 g^3 \gamma_2}. \quad (65)$$

Это неравенство неизбежно нарушится при приближении к точке турбулентного перехода $R \rightarrow R_C$, то есть рассмотренная обобщенная теория Ландау перехода к турбулентности для ФП 2р в самой точке ФП неверна [4, 5].

Логично считать, что [5]

$$|\tau| \ll R_C. \quad (66)$$

Отсюда найдем второе условие применимости теории турбулентности для ФП 2р [5]

$$R_C \gg \frac{\alpha_0^2 T^2}{4^2 a g^3 \gamma_2}. \quad (67)$$

К сожалению, параметры в формуле (67) (кроме критического числа Рейнольдса R_C и абсолютной температуры T в энергетических единицах) для

перехода к турбулентности не оценены. Остается надеяться, что последнее условие выполняется во многих случаях для достаточно низких температур. Для доказательства этого нужна оценка параметров (67), что возможно в рамках численного моделирования турбулентности с привлечением экспериментальных данных. Заметим, что критическое число Рейнольдса порядка сотни, иногда существенно больше [3].

Если постоянная Ландау равна нулю, то условие применимости теории изменяется. Потенциал в этом случае равен (см. (34))

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \eta^2 + \frac{\alpha_1}{12\gamma_2} \eta^6 . \quad (67')$$

Из (59) найдем для УФ

$$\eta^4 = \frac{2\gamma_1}{\gamma_2} = \frac{2a}{\gamma_2} \tau . \quad (67'')$$

Условие применимости теории, как можно показать, приобретает вид

$$\frac{T^2}{g^3 \gamma_2} \ll 1 . \quad (68)$$

Область, соответствующая обратному неравенству в формуле (65), называется флуктуационной [6], в ней необходимо использовать флуктуационную скейлинговую теорию ФП [6, 12-14].

6. Флуктуационная теория турбулентности

Выразим условие применимости теории турбулентности Ландау в более общем виде через критические индексы, причем для простоты считаем, что $\gamma_2 = 1, a = 1$. Условие (65) примет вид

$$\tau^{2-3\nu} \gg \frac{\alpha_0 T}{4g^{3\nu}} . \quad (68')$$

Учитывая флуктуационное скейлинговое равенство для критического индекса теплоемкости [6, 14, 15]

$$\alpha = \alpha' = 2 - d\nu , \quad (69)$$

получим условие применимости обобщенной теории турбулентности Ландау для ФП 2р

$$\tau^\alpha \gg \frac{\alpha_0 T}{4g^{3\nu}} . \quad (70)$$

Обычно для температурных ФП критический индекс теплоемкости положителен [14], тогда при приближении к точке турбулентного перехода это условие нарушится.

Ширина критической флуктуационной области определится из условия

$$\tau_C^\alpha = \frac{\alpha_0 T}{4g^{3\nu}} . \quad (71)$$

Отсюда ширина флуктуационной области для ФП 2р равна

$$\tau_C = \left(\frac{\alpha_0 T}{4g^{3\nu}} \right)^{1/\alpha} . \quad (72)$$

Развитая теория турбулентности (теория среднего поля) для ФП 2р ($\alpha > 0$) применима при

$$\tau = R - R_C \gg \tau_C . \quad (73)$$

Однако переход к турбулентности и переход в сверхтекучее состояние в ^4He в изотропном случае принадлежат к одному классу универсальности (см. выше). Критический индекс теплоемкости для гелия – 4 согласно эксперименту равен [13]

$$\alpha = -0.0127 \pm 0.0003 \approx -0.01 . \quad (74)$$

Есть основания ожидать, что для турбулентного ФП 2р критический индекс аналога теплоемкости также отрицателен (вместо температуры здесь фигурирует число Рейнольдса). Тогда условие применимости обобщенной теории турбулентности Ландау (70) при приближении к точке турбулентного ФП не будет нарушаться. Разумеется, это не означает, что теория турбулентности Ландау в этом случае применима без ограничений вблизи точки перехода. Для выяснения этого вопроса нужен более тщательный анализ. Прежде всего, необходимо экспериментальное или численное определение значения критического индекса аналога теплоемкости для перехода от ламинарного режима к турбулентному. Это задача для будущих исследований.

Заметим, что при отрицательном индексе аналога теплоемкости флуктуационная область определяется неравенством (73), в этой области теория Ландау (теория среднего поля) неверна. Обычно считается, что флуктуационная область определяется обратным неравенством [6] и включает точку ФП.

Теперь рассмотрим трикритическую точку перехода к турбулентности, когда выполняется (22), тогда

$$\tau^\alpha \gg \frac{b \tau T}{2g^{3\nu}} \quad (75)$$

или

$$\tau^{1-\alpha} \ll \frac{g^{3\nu}}{bT} \quad . \quad (76)$$

При приближении к трикритической точке турбулентного перехода это условие также не будет нарушаться.

Для экзотической трикритической точки верно (27). Тогда условие применимости теории турбулентности (65) примет вид

$$T\gamma_2 \ll \frac{\tau^{6-3\nu}}{b\tau} \propto \tau^{5-3\nu} \quad . \quad (77)$$

Это условие при приближении к точке турбулентного перехода будет нарушаться, как для обычного ФП 2р [6].

Один из вариантов флуктуационной скейлинговой теории ФП – это ε -разложение критических индексов [14, 15], где параметр ε равен (d – размерность пространства)

$$\varepsilon = 4 - d \quad . \quad (78)$$

Разложение критических индексов в третьем порядке по ε имеет вид [15]: критический индекс корреляционной длины

$$2\nu = 1 + \frac{(n+2)\varepsilon}{2(n+8)} \left[1 + \frac{\varepsilon(n^2 + 23n + 60)}{2(n+8)^2} + \frac{\varepsilon^2(2n^4 + 89n^3 + 1412n^2 + 5904n + 8640 - D)}{8(n+8)^4} \right], \quad (79)$$

где

$$D = 96(n+8)(5n+22)\zeta(3) \quad . \quad (80)$$

Здесь дзета-функция Римана равна [15]

$$\zeta(3) \approx 1.202 \quad . \quad (81)$$

Критический индекс восприимчивости равен [15]

$$\gamma = 1 + \frac{(n+2)\varepsilon}{2(n+8)} \left[1 + \frac{\varepsilon(n^2 + 22n + 52)}{2(n+8)^2} + \frac{\varepsilon^2(n^4 + 44n^3 + 664n^2 + 2496n + 3104 - D/2)}{4(n+8)^4} \right]. \quad (82)$$

Критические индексы теплоемкости (или ее аналога) α и параметра порядка β равны [15]

$$\alpha = \frac{\varepsilon(4-n)}{2(n+8)} - \frac{\varepsilon^2(n+28)(n+2)^2}{4(n+8)^3} - \frac{\varepsilon^3(n+2)}{8(n+8)^5} [n^4 + 50n^3 + 920n^2 + 3772n + 4800 - D]: \quad (83)$$

$$\beta = \frac{1}{2} - \frac{3\varepsilon}{2(n+8)} + \frac{\varepsilon^2(n+2)(2n+1)}{2(n+8)^3} + \frac{(n+2)\varepsilon^3}{8(n+8)^5} [3n^3 + 128n^2 + 488n + 848 - D/4]. \quad (84)$$

Здесь n – число компонентов параметра порядка (ПП) [15].

Для двухкомпонентного ПП найдем для трехмерного пространства

$$\nu \cong 0.64 \quad ; \quad (85)$$

$$\gamma \cong 1.26 \quad ; \quad (86)$$

$$\alpha_2 \cong -0.02 < 0; \alpha_3 = 0.08 \quad ; \quad (87)$$

$$\beta \cong 0.33 \quad . \quad (88)$$

Техника ε -разложения не является математически строго обоснованной (ряды не являются сходящимися) [14, 15]. Обратим внимание на то, что даже знак критического индекса теплоемкости α_3 в третьем порядке по ε неверный (но является правильным во втором порядке по ε , см. (74)).

Представляется актуальным проверка гипотезы, что критические индексы для перехода от ламинарного движения к турбулентному являются такими же, как для сверхтекучего перехода в гелии-4, так как эти явления в изотропном случае принадлежат к одному классу универсальности. Ситуация нетривиальна по двум причинам. Во-первых, статические критические индексы (такие как индексы теплоемкости, восприимчивости, ПП, корреляционной длины) для гелия-4 относятся к равновесным процессам [11], тогда как те же индексы аналогов величин для перехода к турбулентности относятся к неравновесным процессам, где в качестве температуры выступает число Рейнольдса. Во-вторых,

для сверхтекучего перехода в ^4He , по-видимому, нет области применимости ТФП Ландау [11], тогда как есть надежда, что для перехода от ламинарного движения к турбулентному обобщенная ТФП Ландау применима [1-5].

Приведем экспериментальное значение критического индекса корреляционной длины для сверхтекучего перехода в гелии-4 [13]

$$\nu = 0.6700 \pm 0.0006 . \quad (89)$$

Это значение отличается от значения индекса (85), полученного в рамках ε -разложения, что не удивительно, т. к. результат (85) получен в третьем порядке по ε , тогда как известно ε -разложение индексов выше, чем до пятого порядка по ε [15]. Кстати, в пределах погрешности расчета до третьего порядка по ε значения (85) и (89) совпадают.

7. Заключение

Развита феноменологическая теория начальной стадии развития турбулентности Л.Д. Ландау на случай неоднородной среды как теория фазовых переходов (ФП). Определён параметр порядка для этого случая. Предложено неравновесное разложение термодинамического потенциала по параметру порядка (ПП) для перехода от ламинарного движения к турбулентному. В рамках подхода Ландау рассмотрена неоднородная турбулентность [5]. Впервые поставлен вопрос о критических индексах при переходе от ламинарного движения к турбулентному [5].

Необходимо экспериментальное определение критических индексов для начальной стадии турбулентности, видимо, это возможно также сделать методами компьютерного моделирования [5].

Необходимо выяснить смысл внешнего поля (сопряженного ПП) для перехода от ламинарного движения к турбулентному [5].

Поставлен вопрос о применимости развитой теории к явлению перехода от ламинарного движения к турбулентному, аналогично условиям применимости общей теории ФП Ландау [6]. Для ответа на этот вопрос необходима оценка

параметров разложения термодинамического потенциала в ряд по ПП и других параметров теории. Это, в принципе, можно сделать на основе микроскопической теории турбулентности с привлечением экспериментальных данных, а также методами компьютерного моделирования [5].

Установлена ширина флуктуационной области для различных вариантов перехода от ламинарного движения к турбулентному, в том числе для вариантов, не рассмотренных в оригинальной работе Л.Д. Ландау [1].

В рамках ϵ -разложения оценены критические индексы для перехода от ламинарного движения к турбулентному. Высказана гипотеза о том, что критические индексы для перехода к турбулентности и для сверхтекучего перехода в гелии-4 совпадают, так как эти ФП принадлежат к одному классу универсальности для двухкомпонентного параметра порядка. Это утверждение не является тривиальным, так как статические индексы для сверхтекучего перехода относятся к равновесным процессам, тогда как «статические индексы» для перехода к турбулентности описывают существенно неравновесный процесс.

Список литературы

1. Ландау Л.Д. К проблеме турбулентности / Л.Д.Ландау // ДАН СССР. — 1944. — Т.44. С.339 – 344.
2. Ландау Л.Д. Собрание трудов / Л.Д.Ландау. — М. Наука, 1969. — Т.1 (статья 50) — 512 с.
3. Ландау Л.Д. Теоретическая физика. Т.6. Гидродинамика. 4-е изд. / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. — М., Наука, 1988. — 733 с.
4. Удодов В.Н. Новые аспекты теории турбулентности Л.Д. Ландау / В.Н.Удодов // Южно-Сибирский научный вестник. — 2023. — №.1 (47). С.10 – 15. DOI 10.25699/SSSB.2023.47.1.008.
- 5 Удодов В.Н. Кинетика неоднородной турбулентности в рамках теории фазовых переходов Ландау / В.Н.Удодов // Южно-Сибирский научный вестник. — 2023. — №.6 (52). С.87 – 93. DOI 10.25699/SSSB.2023.52.6.010.

- 6 Ландау Л.Д. Теоретическая физика. Т.5. Статистическая физика. Ч. 1. 4-е изд. / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. — М., Наука, 1995. — 608 с.
7. Гинзбург В.Л. К теории сверхпроводимости / В.Л.Гинзбург, Л.Д.Ландау // ЖЭТФ. — 1950. — Т.20. С.1064.
- 8 Ландау Л.Д. К теории аномалий теплоемкости / Л.Д.Ландау // Phys. Zs. Sowjet. — 1935. — Т.8. С.113.
9. Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов. I / Л.Д.Ландау // Phys. Zs. Sowjet. — 1937. — Т.11. С.26. ЖЭТФ. — 1937. — Т.7. С.19.
10. Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов. II / Л.Д.Ландау // Phys. Zs. Sowjet. — 1937. — Т.11. С.545. ЖЭТФ. — 1937. — Т.7. С.627.
11. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.9. Статистическая физика. Часть 2. Теория конденсированного состояния / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. — М.: Физматлит, 2004. — 496 с.
12. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.10. Физическая кинетика. — Изд. 2 / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. — М.: Физматлит, 2007. — 536 с.
13. Погорелов А.А. О критических индексах для λ -перехода в жидком гелии / А.А.Погорелов, И.М.Суслов // Письма в ЖЭТФ. — 2007. — Т.86, Вып.1. С.41-47 [*JETP Letters*, v. **86**, Iss. 1, 39, sept. (2007) DOI: <https://doi.org/10.1134/S0021364007130097>].
14. Паташинский А.З., Флуктуационная теория фазовых переходов / А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. — М.: Наука, 1982. — 382 с.
15. Васильев А.Н. Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике / А.Н.Васильев. — ПИЯФ РАН, СПб., 1998. — 774 с.

УСТОЙЧИВЫЕ И НЕУСТОЙЧИВЫЕ РЕЖИМЫ РОСТА ВЕРШИНЫ ДЕНДРИТА В ПЕРЕОХЛАЖДЕННОМ РАСПЛАВЕ ЧИСТОГО ВЕЩЕСТВА

Шабловский О.Н., Кроль Д.Г.

Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого,
Гомель, Республика Беларусь, *shablovsky-on@yandex.ru*

Введение. Дендритный рост кристалла из переохлажденного расплава чистого вещества происходит при достаточно больших переохлаждениях: например, для никеля при $\Delta T > 57\text{K}$. Эволюционные свойства линии роста дендрита в значительной степени детерминированы процессами, происходящими на его вершине. В настоящей работе представлены два подхода к теоретическому исследованию возмущенного состояния вершины дендрита. В качестве примеров расчета рассматриваются переохлажденные расплавы никеля и меди. Актуальность этой задачи обусловлена современными экспериментальными данными измерений скорости роста кристалла (20–70 м/с) при переохлаждениях, достигающих 300 К [1]. В таких условиях система «расплав - кристалл» находится в отчетливо выраженном локально-неравновесном состоянии, и для ее изучения необходимо применять неклассический термодинамический подход [2]. Современное состояние теоретических и экспериментальных исследований физики роста дендритов представлено в статьях и обзорах [3-6].

Цель данной работы: указать два подхода к решению названной проблемы и продемонстрировать их возможности при анализе устойчивых и неустойчивых состояний вершины дендрита.

Моделирование линии роста кристалла.

Рассмотрим двухмерный плоский случай. Фазовую границу кристаллизации (ФГК) моделируем плоской линией сильного разрыва $x - F(y, t) = 0$. Средняя кривизна этой границы равна $K = (\partial^2 F / \partial y^2) / G^3$, $G = (1 + (\partial F / \partial y)^2)^{1/2}$. Здесь координата x направлена вдоль оси симметрии

дендрита в сторону твердой фазы; y – поперечная декартова координата. Для дальнейших рассуждений важное значение имеет угол θ , который образует нормаль \mathbf{n} границы с осью x : $\cos\theta = 1/G$. ФГК перемещается со скоростью N справа налево ($\mathbf{N} = N\mathbf{n}$, $N < 0$), и на ее вершине $\partial F / \partial y = 0$, $\cos\theta = 1$. По мере удаления от вершины $\cos\theta$ монотонно убывает: $\cos\theta \rightarrow 0$, $\theta \rightarrow \pi/2$. Угол заострения линии роста равен $\theta_1 = (\pi/2) - \theta$, рисунок 1. Теплофизические свойства расплава и кристалла берем постоянными. Это допущение оправдано тем, что относится к уже сформировавшемуся сильному разрыву.

Уравнение роста $N \equiv (\partial F / \partial t) / G = -\mu(T_e - T_j)$ имеет вид [7]:

$$\partial^2 F / \partial y^2 = \alpha B + \varphi(\partial F / \partial t)[1 + (\partial F / \partial y)^2], \quad \alpha = L/(UT_c), \quad \varphi = \alpha / \mu. \quad (1)$$

Приняты обозначения: L – теплота фазового перехода единицы объема вещества; μ – кинетический коэффициент роста; T_e – температура равновесия между твердой и жидкой фазами; T_c – равновесная температура кристаллизации; U – поверхностная энергия границы раздела фаз; B – переохлаждение на вершине дендрита; ΔT – переохлаждение расплава; c – объемная теплоемкость; λ – коэффициент теплопроводности; $N_m = -N > 0$. При выводе этого уравнения была учтена пространственная неоднородность переохлаждения ФГК.

Дифференциальное уравнение, описывающее малое возмущение $f = f(y, t)$ стационарного контура линии роста, имеет вид

$$\partial^2 f / \partial y^2 = B_1(\partial f / \partial y) + B_2(\partial f / \partial t), \quad (2)$$

$$A_1 = -\mu B / (1 + A_2^2) < 0, \quad A_2 > 0, \quad B_1 = 2\varphi A_1 A_2 < 0, \quad B_2 = (1 + A_2^2)\varphi > 0; \quad A_1, A_2, B \equiv \text{const}. \quad (3)$$

Линеаризация уравнения (1) в виде $F(y, t) = F^0(y, t) + f(y, t)$, была выполнена на точном решении $F^0 = A_1 t + A_2 y$, которое определяет с заданной точностью клиновидный контур линии роста на конечном удалении от вершины дендрита.

Параметр B_1 , содержащий A_1A_2 , несет информацию о мультипликативном взаимодействии скорости ФГК и ее заострения: $A_1 = \frac{N}{\sin \theta_1}$, $A_2 = \frac{1}{\operatorname{tg} \theta_1}$.

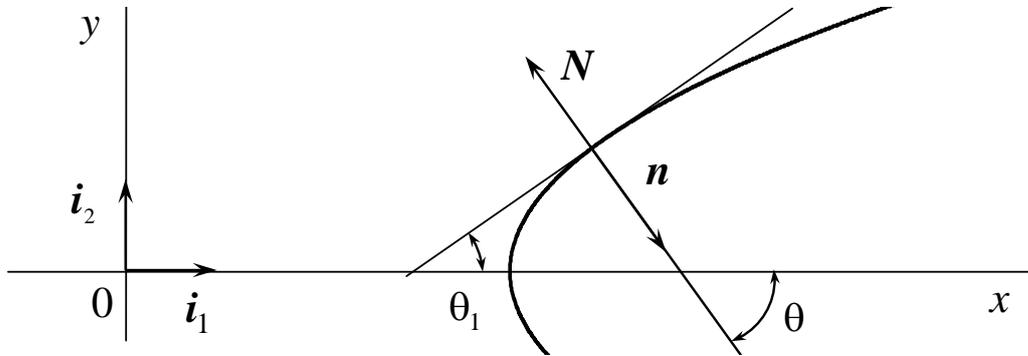


Рис. 1. Угол θ_1 заострения линии роста

Уравнение фазовой границы кристаллизации расплава для больших переохлаждений ΔT получено в [8-9] с учетом локально-неравновесных свойств теплопереноса в твердой фазе:

$$\begin{aligned} & (L + L_* + U_2 K) \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{N}{\gamma} (L_* + U_2 K) - \frac{cN^2}{\gamma\mu} - \frac{3c}{\mu} N \frac{\partial N}{\partial t} + \\ & + L\gamma \frac{\partial^2 N}{\partial t^2} + 2U_2 N \frac{\partial K}{\partial t} + N(q_v + q_{nj} K) = 0, \quad \frac{\partial K}{\partial t} = \frac{\partial^2 N}{\partial y^2}. \end{aligned} \quad (4)$$

Точным решением этого уравнения является одиночный параболический дендрит $x = F_0(y, t)$, для которого $F_0(y, t) = N_0 t + (K_0 y^2 / 2)$.

Здесь $N_0 < 0$; $N_m = -N_0$; $K_0 > 0$ - кривизна вершины дендрита. Исходные уравнения ФГК (4) определяют локальный по координате y закон распространения линии роста в малой окрестности вершины $y = 0$. Для возмущенной линии роста $x = F(y, t)$ процедура линеаризации вида $F(y, t) = F_0(y, t) + f(y, t)$ дает уравнение, определяющее эволюцию малого возмущения $f(y, t)$, [9]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} - \alpha_0 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right) + \alpha_1 \frac{\partial f}{\partial t} + \alpha_2 \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} - \alpha_3 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 0, \quad (5)$$

$$\alpha_i = s_i / (L\gamma), \quad i = 0, 1, 2, 3;$$

$$s_0 = -2N_0U_2, \quad s_1 = (2K_0N_0^2c/\mu) - (cN_0/\gamma\mu) - K_0N_0L_* - K_0^2N_0U_2, \quad (6)$$

$$s_2 = L + L_* + K_0U_2 - (3cN_0/\mu) - K_0N_0L\gamma,$$

$$s_3 = 2K_0N_0^2U_2 + N_0^2L_* - (N_0U_2/\gamma) - (cN_0^3/\mu);$$

$$L_* = L - c_*\Delta T, \quad U_1 = U/L, \quad U_2 = cT_cU_1.$$

Здесь c_* - объемная теплоемкость расплава; γ - время релаксации теплового потока; $N = \partial F/\partial t$; $K = \partial^2 F/\partial y^2$; $q_{nj} = N[(cN/\mu) - U_2K - L_*] - L\gamma(\partial N/\partial t)$; $U_2 = cT_cU_1$; $U_1 = U/L$; $L_* = L - c_*\Delta T$; $q_u < 0$ - объемный сток энергии, который моделирует отвод тепла от твердой фазы. Остальные подробности вывода уравнения ФГК и уравнения возмущений (5) изложены в [9]. Для подсчета зависимости коэффициентов $\alpha_i = \alpha_i(\Delta T)$ применяем полуэмпирические функции $N_m = N_m(\Delta T)$ и $\mu = \mu(\Delta T)$, полученные в [6] для никеля и меди. Числовые расчеты выполнены при следующих значениях кинетических и теплофизических параметров.

Никель, Ni: $166 \leq \Delta T, K \leq 312$; $T_c = 1728 \text{ К}$, $L = 2,14 \cdot 10^9 \text{ Дж/м}^3$, $U = 0,37 \text{ Дж/м}^2$,
 $N_m, \text{ м/с} = -13,420624 + 0,28349333 \cdot \Delta T - 0,00014256896 \cdot \Delta T^2$,

$$c = 5,62 \cdot 10^6 \text{ Дж/(м}^3 \cdot \text{К)},$$

$$\mu, \text{ м/(с град)} = -1,431334 + 0,066524 \cdot \Delta T - 2,954532 \cdot 10^{-6} \cdot \Delta T^2, \quad \gamma = 1,3804 \cdot 10^{-7} \text{ с},$$

$$c_* = 6,0403 \cdot 10^6 \text{ Дж/(м}^3 \cdot \text{К)}, \quad \lambda = 69 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}.$$

Медь, Cu: $180 \leq \Delta T, K \leq 230$; $T_c = 1357 \text{ К}$, $L = 1,77 \cdot 10^9 \text{ Дж/м}^3$, $U = 0,26 \text{ Дж/м}^2$,
 $N_m, \text{ м/с} = -351,30086 + 3,1413105 \cdot \Delta T - 0,0054439132 \cdot \Delta T^2$;

$$c = 4,17 \cdot 10^6 \text{ Дж/(м}^3 \cdot \text{К)},$$

$$\mu, \text{ м/(с град)} = 35,326602 - 851,17268 \cdot \exp(-0,019538945 \cdot \Delta T); \quad \gamma = 4,763 \cdot 10^{-7} \text{ с},$$

$$c_* = 4,45267 \cdot 10^6 \text{ Дж/(м}^3 \cdot \text{К)}, \quad \lambda = 317 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}.$$

В формулах (6) кривизна K_0 - свободный параметр, числовое значение которого мы берем на основе известных в литературе результатов экспериментальных измерений. В представленной здесь серии расчетов было принято для всех вариантов $R_0 = 1/K_0 = 0,2 \cdot 10^{-6}$ м; характерные масштабы времени и поперечного размера такие: $t_b = 10^{-7}$ с, $y_b = 10^{-6}$ м.

Волна возмущения линии роста. Берем за основу решение

$$f(y,t)/H = \exp(-ky) \exp \left[\left(h_1 + \frac{k^2}{B_2} \right) t + h_2 y \right], \quad h_1 = -B_1^2/(4B_2) < 0, \quad h_2 = B_1/2 < 0.$$

где $y \geq 0$, $t \geq 0$; H , k – произвольные постоянные; посредством выбора H это решение можно сделать сколь угодно малым. Волна

$$h_2 y = - \left(h_1 + \frac{k^2}{B_2} \right) t + \text{const}$$

распространяется по неоднородному фону $f_0(y)/H = \exp(-ky)$, $k > 0$, $y \geq 0$ со скоростью

$$V = - \frac{2}{B_1 B_2} \left(k^2 - \frac{B_1^2}{4} \right). \quad (7)$$

Формулы для $B_1 < 0$, $B_2 > 0$ записаны в (3). Характерная ширина зоны неоднородности равна $y_1 = 1/(-k)$. Из (7) ясно, что волна движется от вершины на периферию дендрита ($V > 0$), если $k^2 > (B_1^2/4)$, т.е. при $[k^2/(\varphi^2 A_1^2)] > A_2^2$ или, что то же самое, при $k^2 > k_*^2$,

$$k_*^2 = \frac{\varphi^2 N^2}{\sin^2 \theta_1 \text{tg}^2 \theta_1} = (B_1^2/4).$$

Волна движется с периферии дендрита к вершине ($V < 0$), если $k^2 < k_*^2$. Здесь k_* характеризует пороговую ширину зоны неоднородности исходного возмущения, причем $V(k^2 = k_*^2) = 0$. Процесс устойчивый и решение аperiodическое по t ,

если $V < 0$: волна идет с периферии к вершине, $k^2 < k_*^2$. Процесс неустойчивый, если $V > 0$: волна идет от вершины на периферию, $k^2 > k_*^2$. На основе формулы (7) получаем

$$V^2 = \frac{(k^2 - \varphi^2 A_1^2 A_2^2)^2}{[\varphi^2 A_1 A_2 (1 + A_2^2)]^2}. \quad (8)$$

Здесь $V^2 \rightarrow \infty$ при $A_2 \rightarrow 0$, т.е. при $\theta_1 \rightarrow (\pi/2)$. Если $A_2 \rightarrow \infty$, т.е. $\theta_1 \rightarrow 0$, то $V^2 \rightarrow 0$. В данном случае имеем экспоненциальный по t характер возбуждения волны при $y = 0$. Функция $V^2 = V^2(k^2, A_2^2)$ ведет себя немонотонно по отношению к аргументу A_2^2 . А именно: при каждом фиксированном $k > 0$ имеем $\partial(V^2)/\partial(A_2^2) = 0$ вдоль линии

$$k^2 = \varphi^2 A_1^2 \frac{A_2^2 (A_2^2 - 1)}{(1 + 3A_2^2)} = k_*^2 \frac{(A_2^2 - 1)}{(1 + 3A_2^2)},$$

которая существует при $A_2^2 > 1$, т.е. при $0 < \text{tg}\theta_1 < 1$. Функция V^2 имеет максимум по отношению к аргументу $\text{tg}\theta_1$, рисунок 2.

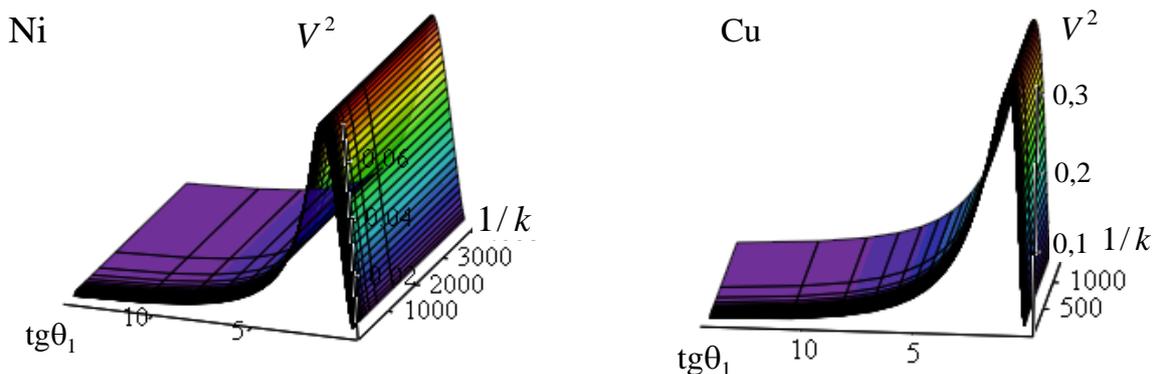


Рис. 2. Зависимость квадрата скорости волны возмущения (8) от ширины зоны неоднородности и от тангенса угла заострения линии роста

Влияние пространственной неоднородности линии роста. Решение уравнения (5) возьмем в виде: $f(y, t)/H = \exp(h_1 t + r y)$,

$$r = - \left[\frac{h_1(h_1^2 + \alpha_2 h_1 + \alpha_1)}{\alpha_0 h_1 + \alpha_3} \right]^{1/2} < 0, \quad h_1^\pm = \left(-\alpha_2 \pm \sqrt{\alpha_2^2 - 4\alpha_1} \right) / 2,$$

где h_1^\pm - действительные отрицательные числа. Волна возмущения $y = Vt$,

$V = -h_1 / (r_1 + r) > 0$ распространяется по апериодическому фону

$$f_0(y) / H = \exp(-r_1 y), \quad r_1 > 0.$$

Здесь характерные размеры пространственной неоднородности фона и возмущенной области равны соответственно $1/r_1$ и $1/(-r)$. Обозначим отношение этих размеров как $\delta_0 = r_1 / (-r)$ и запишем скорость волны в виде

$$V(\delta_0 - 1) = h_1 / r.$$

Устойчивый режим существует ($V > 0$), если $\delta_0 > 1$. А это значит, что характерный размер зоны неоднородности увеличивается после прохождения фронта волны: $[1/(-r)] > (1/r_1)$. Типичный пример расчета показан на рисунке 3.

Истолкование двузначной зависимости $V(\delta_0 - 1)$ от $1/(-r)$ состоит в следующем.

В данном режиме возбуждения одному значению r соответствуют два значения h_1 : $h_1^{(1)}$ и $h_1^{(2)}$, определяющие характерные времена затухания волны; см. корреляцию $1/(-h_1) \leftrightarrow 1/(-r)$ на рисунке 3. Тогда имеем два значения r_1 и два значения δ_0 , соответствующие одной и той же скорости волны V :

$$r_1^{(i)} = -r - (h_1^{(i)} / V), \quad \delta_0^{(i)} = r_1^{(i)} / (-r), \quad i = 1, 2.$$

Следовательно, одна и та же скорость волны наблюдается для двух ситуаций с параметрами $(r_1^{(1)}, h_1^{(1)})$ и $(r_1^{(2)}, h_1^{(2)})$.

Возьмем для сравнения неустойчивый апериодический режим возмущения линии роста: применяем прежнее решение, но теперь $h_1 > 0$ - любое положительное число; кроме того, имеем $r < 0$, $r_1 > 0$, $r_1 + r < 0$. Значит, скорость волны равна

$$V = h_1 / [-r(1 - \delta_0)] > 0.$$

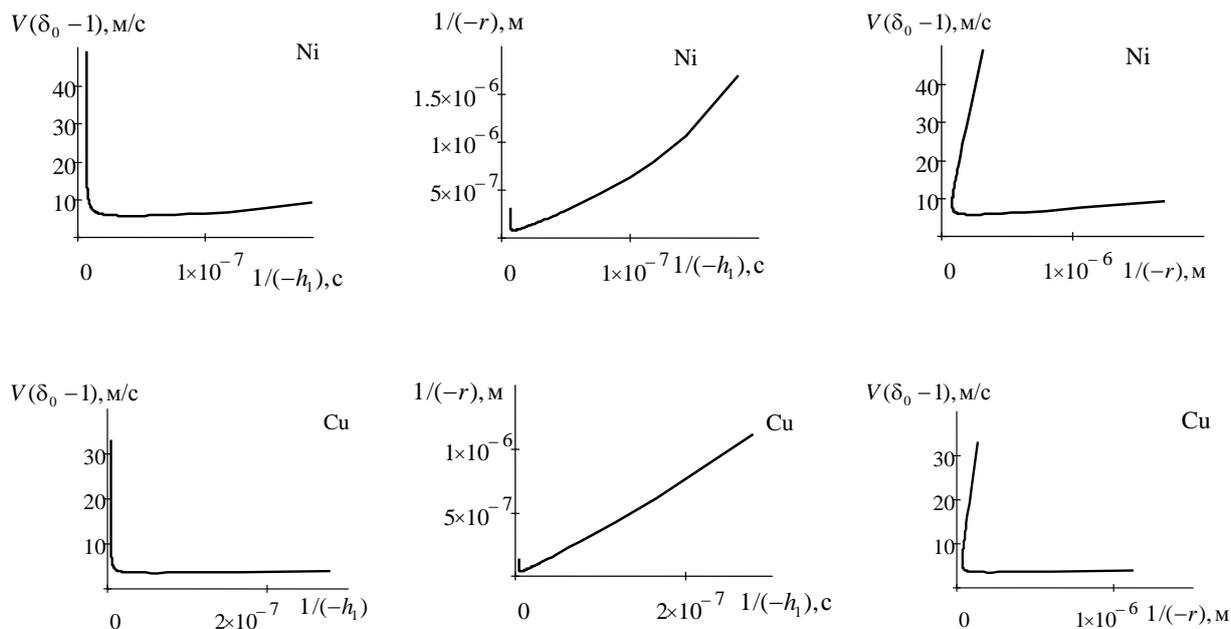


Рис. 3. Аperiodический по координате устойчивый режим возмущения.

Влияние характерных размеров пространственной неоднородности линии роста на свойства волны: Ni, $\Delta T = 166 \text{ K}$; Cu, $\Delta T = 190.2 \text{ K}$

Этот неустойчивый процесс возникает из-за того, что после прохождения фронта волны ширина зоны неоднородности уменьшается: $0 < \delta_0 < 1$. Расчеты показывают, что здесь отсутствует двузначность, присущая устойчивому режиму.

Заключение. Даны примеры устойчивых и неустойчивых состояний линии роста дендрита в переохлажденных расплавах никеля и меди. Важное отличие подхода, основанного на уравнении (5), от расчетов, основанных на уравнении (2), в том, что коэффициенты уравнения (5) зависят явным образом от переохлаждения расплава ΔT . В математическом отношении существенно, что (2) – это уравнение параболического типа, а уравнение (5) содержит два волновых оператора, которым соответствуют две «скорости звука» $w_1^2 = \alpha_0$, $w_2^2 = \alpha_3 / \alpha_2$, $0 < w_1^2 < w_2^2$. Это обстоятельство в значительной степени влияет на динамические свойства устойчивости / неустойчивости линии роста дендрита. В работе [10] дано подробное обсуждение дозвуковых, звуковых и

сверхзвуковых режимов распространения волн возмущения, бегущих со скоростью b : $b^2 \leq w_1^2 < w_2^2$; $w_1^2 < b^2 \leq w_2^2$; $w_1^2 < w_2^2 < b^2$.

Список литературы

1. Herlach, D.M. Metastable Solids from Undercooled Melts / D.M. Herlach, P. Galenko, D. Holland-Moritz –Oxford: Pergamon, 2007. – 448 p.
2. Жоу, Д. Расширенная необратимая термодинамика / Д. Жоу, Х Касас-Баскес, Дж. Лебон – Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика». 2006. – 528 с.
3. Mullis, A.M. Deterministic side-branching during thermal dendritic growth / A.M. Mullis // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. – 2015. – Vol. 84. – 012071. – P. 1-9.
4. Strickland, J. On Directional Dendritic Growth and Primary Spacing – A Review / J. Strickland, B. Nenchev // Crystals. – 2020. – Vol. 10. – №7. – P. 627-656.
5. Kurz, W. Progress in modeling solidification microstructures in metals and alloys. Part II: dendrites from 2001 to 2018 / W. Kurz, M. Rappaz, R. Trivedi //Int. Mater. Rev. – 2021. – Vol. 66. – №1. – P. 30-76.
<https://doi.org/10.1080/09506608.2020.1757894>
6. Шабловский, О.Н. Динамика неустойчивости волновых возмущений и боковое ветвление дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль // Успехи прикладной физики. – 2022. – №2. – С. 189-202.
7. Шабловский, О.Н. Морфологические свойства линии роста двумерного дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский // Прикладная физика. – 2012. – №4. – С. 40–46.
8. Шабловский, О. Н. Кинетика роста вершины дендрита в глубоко переохлажденном расплаве. Часть I. Уравнение фазовой границы кристаллизации // Успехи прикладной физики. – 2013. – Т. 1, № 6. – С. 680–685.
9. Шабловский, О. Н. Кинетика роста вершины дендрита в глубоко переохлажденном расплаве. Часть II. Аналитическая структура возмущений

линии роста / О. Н. Шабловский // Успехи прикладной физики. — 2014.— Т. 2.— №1.— С. 12-17.

10. Шабловский, О. Н. Область устойчивости возмущенного состояния линии роста дендрита в глубоко переохлажденном расплаве / О. Н. Шабловский // Вестник Гомельского государственного технического университета имени П. О. Сухого: научно-практический журнал. – 2023. – № 1.— С. 5—12.

СПИСОК ДОКЛАДОВ

Х.С.Аль Уатик, С.П.Пронин ENHANCING WIND TURBINE GEARBOX RELIABILITY: A HY-BRID DEEP LEARNING APPROACH FOR PREDICTIVE MAINTENANCE	3
С.С. Анцыферов, К.Н. Фазилова НЕРАВНОВЕСНЫЕ СИСТЕМЫ В УПРАВЛЕНИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМИ ПРОЦЕССАМИ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО ПРОИЗВОДСТВА	9
Н.М. Богатов, В.С. Володин, Л.Р. Григорьян, М.С. Коваленко РАСЧЕТ ИЗМЕНЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ПОВЕРХНОСТНОЙ ОБЛАСТИ N-P ПЕРЕХОДА НА ОСНОВЕ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА	13
С.Л. Гафнер, А.А. Череповская ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ПРОЦЕССА ОБЪЕДИНЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ AU И AG	22
С.Е.Головенкин ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СОХРАНЕНИЯ СОКРАТИТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ СЕРДЦА У ПАЦИЕНТОВ ПОСЛЕ ПЕРЕНЕСЕННОГО ИНФАРКТА МИОКАРДА	28
Л.Р. Григорьян, Н.М. Богатов, Р.Л. Григорьян ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ МЕТОД АНАЛИЗА ЧАСТОТНЫХ ПОГРЕШНОСТЕЙ РЕЗИСТИВНЫХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ПЕРЕМЕННЫХ СИГНАЛОВ	45
Е.Е. Иванко, А.Н. Белоусов МОДЕЛИРОВАНИЕ МАКРОЭВОЛЮЦИИ В ИСКУССТВЕННЫХ	

БИОСФЕРАХ	52
Н.И. Косарев	
МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ УЛЬТРАХОЛОДНОЙ НАТРИЕВОЙ ПЛАЗМЫ, СОЗДАННОЙ В ПРОЦЕССЕ ОДНО- И ДВУХСТУПЕНЧАТОЙ ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМОВ	62
В.Н.Удодов	
ФЛУКТУАЦИИ ПРИ ТУРБУЛЕНТНОСТИ В РАМКАХ ПОДХОДА ЛАНДАУ	71
Шабловский О.Н., Кроль Д.Г.	
УСТОЙЧИВЫЕ И НЕУСТОЙЧИВЫЕ РЕЖИМЫ РОСТА ВЕРШИНЫ ДЕНДРИТА В ПЕРЕОХЛАЖДЕННОМ РАСПЛАВЕ ЧИСТОГО ВЕЩЕСТВА	88

АЛФАВИТНЫЙ СПИСОК УЧАСТНИКОВ СЕМИНАРА

Участник	Адрес	Стр.
Аль Уатик Хассан Саидович	656038, Российская Федерация, Алтайский край, г. Барнаул, пр. Ленина, 46, факультет информационных технологий E-mail: alh@dr.com	3
Анцыферов Сергей Сергеевич	119454, ЦФО, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 78, МИРЭА – Российский технологический университет, Физико-технологический институт, каф. метрологии и стандартизации E-mail: c_standard@fel.mirea.ru	9
Белоусов Алексей Николаевич	620990, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, д. 16, Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского Уральского отделения Российской академии наук (ИММ УрО РАН) E-mail: belousov_an@uran.ru	52
Богатов Николай Маркович	350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149 ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет» E-mail: bogatov@phys.kubsu.ru	13, 45
Володин Владимир Сергеевич	350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149 ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет» E-mail: volodinvs1995@mail.ru	13

Гафнер Светлана Леонидовна	655017, г. Абакан, ул. Ленина, д. 92 Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова E-mail: sgafner@rambler.ru	22
Головенкин Сергей Евгеньевич	660022, Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, ФГБОУ ВО «Красноярский Государственный Медицинский Университет им. проф. В.Ф.Войно-Ясенецкого» МЗ РФ, E-mail: gse2008@mail.ru	28
Григорьян Леонтий Рустемович	350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149 ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет» E-mail: leonmezon@mail.ru	13, 45
Григорьян Рустем Леонтьевич	350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149 ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет» E-mail: mezon_kub@mail.ru	45
Иванко Евгений Евгеньевич	620990, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, д. 16, Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского Уральского отделения Российской академии наук (ИММ УрО РАН) E-mail: evgeny.ivanko@gmail.com	52
Коваленко Максим Сергеевич	350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149 ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет» E-mail: m.s.kovalenko@ya.ru	13

Косарев Николай Иванович	660025, Красноярск, просп. имени газеты Красноярский Рабочий, 95, Сибирский федеральный университет, Институт цветных металлов E-mail: Kosarev_nikolai@mail.ru	62
Кроль Дмитрий Григорьевич	Республика Беларусь, 246746, г. Гомель, пр-т Октября, 48, Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого E-mail: dk_zaoch@gstu.by	88
Пронин Сергей Петрович	656038, Российская Федерация, Алтайский край, г. Барнаул, пр. Ленина, 46, факультет информационных технологий E-mail: sppronin@mail.ru	3
Удодов Владимир Николаевич	655017, Абакан, пр. Ленина, д. 92/1, каб. 513, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ), E-mail: udodov@khsu.ru	71
Фазилова Ксения Наильевна	119454, ЦФО, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 78, МИРЭА – Российский технологический университет, Физико-технологический институт E-mail: fazilova@mirea.ru	9
Череповская Арина Александровна	655017, г. Абакан, ул. Ленина, д. 92 Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова E-mail: arina.cherepovskaya@mail.ru	22

Шабловский Олег Никифорович	Республика Беларусь, 246746, г. Гомель, пр-т Октября, 48, Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого E-mail: shablovsky-on@yandex.ru	88
--------------------------------	---	----

Научное издание

**Моделирование неравновесных адаптивных и управляемых систем–
2024**

Материалы XXVII Всероссийского семинара 4 октября 2024 г.

Редактор М.Г. Садовский
Компьютерная верстка: М.Ю. Сенашова

Подписано в печать «4» сентября 2024 г. Формат 60 × 90/8. (А4)
Бумага офсетная. Печать плоская.
Усл. печ. л. 13,56. Уч.-изд. л. 11,81.
Тираж 300 экз. Заказ 14

Институт вычислительного моделирования СО РАН
660036, Красноярск, Академгородок, 50, стр. 44
Тел/факс (391) 2907476
<http://icm.krasn.ru>

Отпечатано в типографии ИВМ СО РАН
660036, Красноярск, Академгородок