

В заключении необходимо отметить, что гидрофильные НЧ, солюбилизованные по оригинальной методике, очень чувствительны к внешнему однородному электрическому полю. Выполненная калибровка позволит в дальнейшем определить по спектральным изменениям напряженности, возникаемые в тканях разного уровня патологии при развитии карциногенеза.

*Работа выполнена при поддержке МО РБ в рамках ГПНИ «Конвергенция» (задание 3.03.12).*

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Стрекаль, Н. Д. Штарковская спектроскопия для биологических систем / Н. Д. Стрекаль, С. А. Маскевич // Наука и инновации. – 2013. – № 11 (129). – С. 62–65.
2. Способ модификации поверхности наночастиц CdSe/ZnS: пат. 17735 ВУ, МПК6 C09K11/88, B82B3/00, МПК11 B82Y 15/00. / Н. Д. Стрекаль, С. А. Маскевич; заявитель ГрГУ им. Я. Купалы; заявл. 04.05.2011; опубл. 30.12.2013//Афіцыйны бюл. Нац. цэнтр інтэлектуал. уласнасці. – 2013. – № 6. – С. 107.
3. *Bublitz, G. U. Stark spectroscopy: applications in chemistry, biology, and materials science / G. U. Bublitz, S. G. Boxer //Ann Rev. – 1997. – No. 48. – P. 213–243*
4. *Javier, A. Nanosecond exciton recombination dynamics in colloidal CdSe quantum dots under ambient conditions / A. Javier, D. Magana, T. Jennings, G. F. Strouse // Appl. Phys. Lett. – 2003. – Vol. 83. – P. 1423.*
5. URL: [https://market.grsu.by/faculty\\_services/ftf/shtarkovskiy-spektrometr](https://market.grsu.by/faculty_services/ftf/shtarkovskiy-spektrometr).

## ЧИСЛЕННАЯ СИМУЛЯЦИЯ ПОТОКОВ ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ В СРЕДЕ OpenFOAM В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ ПРИ ОБУЧЕНИИ МЕДИЦИНСКОЙ И БИОЛОГИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

### NUMERICAL SIMULATION OF VISCOUS FLUID FLOW IN EDUCATIONAL PROCESS WHEN TEACHING MEDICAL AND BIOLOGICAL PHYSICS USING OPENFOAM

***Е. П. Наумюк, А. П. Кравчук, А. А. Самусев***  
***E. Naumiuk, A. Kravchuk, A. Samusev***

*Гродненский государственный медицинский университет, г. Гродно, Республика Беларусь*  
*fizika@grsmu.by*  
*Grodno State Medical University, Grodno, Republic of Belarus*

Предлагается использовать численное моделирование потоков вязких жидкостей в лабораторном практикуме для студентов медицинских вузов при изучении тем по гидродинамике идеальных и вязких жидкостей, гемодинамике, а также в качестве лекционных демонстраций. Поскольку не всегда возможна постановка физического эксперимента, численная симуляция гидродинамических потоков позволяет наглядно проиллюстрировать различные режимы течения вязких биологических жидкостей для различных параметров сред и для сосудов с различной геометрией. Приводится конкретный пример использования методов вычислительной гидродинамики в специальной свободно распространяемой интегрируемой среде OpenFOAM, описаны все этапы решения задачи и представлены результаты в наглядном графическом виде.

Numerical modeling of viscous fluid flow is proposed to use in a laboratory workshop for students of medical universities when studying topics in hydrodynamics of ideal and viscous fluids, hemodynamics, and also as lecture demonstrations. Since it is not always possible to set up a physical experiment, the numerical simulation of hydrodynamic flow makes it possible to visualize various flow regimes of viscous biological fluids for various parameters of media and for vessels with different geometry. A specific example of use of computational fluid dynamics method with a special free distributed software OpenFOAM is described. All stages of solving the problem are described. The results are presented in a visual graphical form.

*Ключевые слова:* число Рейнольдса, ламинарное течение, турбулентное течение, математическое моделирование, OpenFOAM.

*Keywords:* Reynolds number, laminar flow, turbulent flow, mathematical modeling, OpenFOAM.

Решение задач гидродинамики, акустики, физиологии кровообращения требует изучения динамики течения вязких сред. Важная роль в этой области принадлежит эксперименту. Проведение физического и математического моделирования дополняют друг друга. Такой подход позволяет формировать у обучающихся более полное и глубокое представление об изучаемых гидродинамических процессах. В современных методах диагностики сложно обойтись без графических методов моделирования и визуализации динамических процессов. Математическая модель – это приближенное описание какого-либо класса явлений или объектов реального мира на языке математики. Основная цель моделирования – исследовать эти объекты и предсказать результаты будущих наблюдений.

Компьютерное моделирование позволяет значительно ускорить расчет математической модели. Некоторые модели можно использовать и в медицинской практике для диагностики и изучения движения вязких биологических жидкостей по различным системам организма.

Движение вязких ньютоновских сред математически описывается уравнениями Навье–Стокса [1]. Это система дифференциальных уравнений в частных производных. К ним добавляются еще начальные и граничные условия. Точное решение системы этих уравнений возможно только для некоторых простейших случаев, в иных более сложных ситуациях используются численные методы решения.

В настоящее время существует множество программ вычислительной гидродинамики. Среди них хорошо зарекомендовал себя пакет OpenFOAM (англ. Open Source Field Operation And Manipulation CFD ToolBox) — открытая и свободно интегрируемая платформа для численного моделирования задач механики сплошных сред [2]. Данный инструментариум оперирует со скалярными, векторными и тензорными полями. Среди ряда задач, которые позволяет решать OpenFOAM – гидродинамика ньютоновских и неньютоновских вязких жидкостей, как в несжимаемом, так и сжимаемом приближении с учетом конвективного теплообмена и действием сил гравитации. В основе кода лежит набор библиотек, предоставляющих инструменты для решения систем дифференциальных уравнений в частных производных. Рабочим языком кода является ООП C++. В терминах данного языка большинство математических дифференциальных и тензорных операторов в программном коде уравнений может быть представлено в удобочитаемой форме, а метод дискретизации и решения для каждого оператора может быть выбран уже пользователем в процессе расчёта. Таким образом, в коде полностью разделяются понятия расчетной сетки (метод дискретизации), дискретизации основных уравнений и методов решения алгебраических уравнений. Вместе с кодом поставляется набор программ-«решателей», в которых реализованы различные математические модели механики сплошных сред. Например, simpleFoam – решатель для стационарного несжимаемого турбулентного потока. Программа может работать под Windows через виртуальную машину.

Основные шаги компьютерного анализа течения жидкости представлены в табл. 1.

Таблица 1 – Этапы решения задач

Этапы	Содержание	Инструмент
Подготовка расчетов	Построение сетки	утилита blockMesh пакета OpenFOAM
	Начальные, граничные условия	Файлы настроек
Вычисления	simpleFoam (стандартный решатель для стационарных задач)	OpenFoam
Визуализация результатов	Графическая форма, сохранение данных в файлы	ParaView

Приведем пример наглядного воспроизведения различных режимов течения вязких биологических жидкостей для различных параметров сред. Покажем результаты решения задачи стационарного течения вязкой несжимаемой среды в плоском канале с обратным уступом (рис. 1). Моделирование течения произведено в OpenFOAM 3.0.1. Для моделирования ламинарного течения заданное число Рейнольдса ( $Re$ ) равно 100, для турбулентного случая – 50 000. Использована вычислительная модель турбулентности k- $\Omega$ -SST, реализованная в среде OpenFOAM.

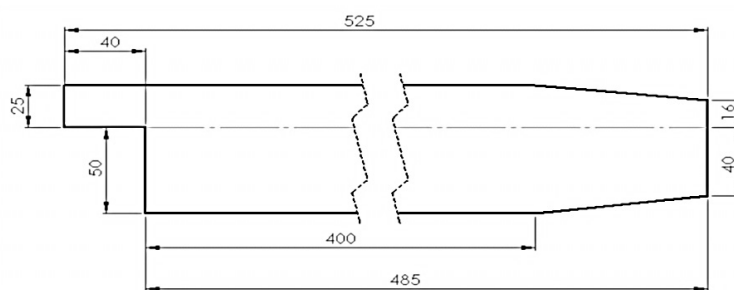


Рисунок 1 – Геометрия области симуляции

С помощью команды blockMeshDict в программной среде OpenFOAM область симуляции разбита на ячейки, фрагмент которой показан на рис. 2.

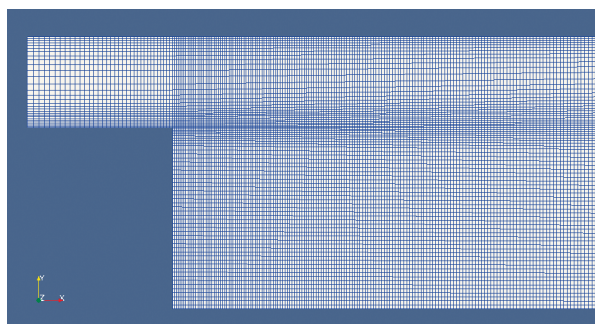


Рисунок 2 – Геометрия области симуляции, разбитая на ячейки (фрагмент)

В результате моделирования ламинарного потока получено распределение стационарного поля давлений, представленное на рис. 3 и стационарное поле скорости, представленное на рис. 4.

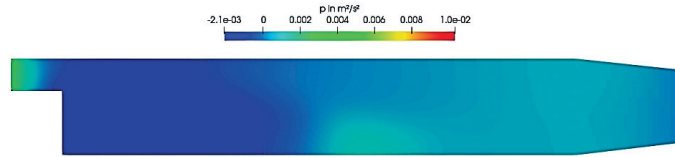


Рисунок 3 – Графическое представление стационарного поля давления.  $Re = 100$

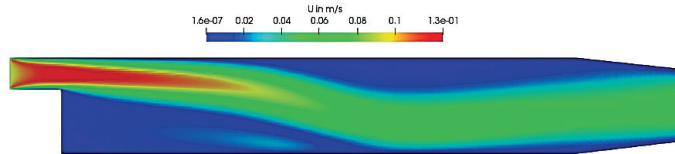


Рисунок 4 – Графическое представление стационарного поля скорости.  $Re = 100$

Для более детального анализа потока во встроенной графической среде paraFoam построено векторного поля скорости (рис. 5).

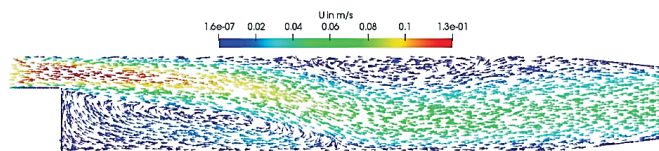


Рисунок 5 – Векторное поле скорости.  $Re = 100$

Результаты моделирования турбулентного потока с использованием модели турбулентности  $k$ - $\Omega$ -SST представлены на рис. 6, 7 и 8.

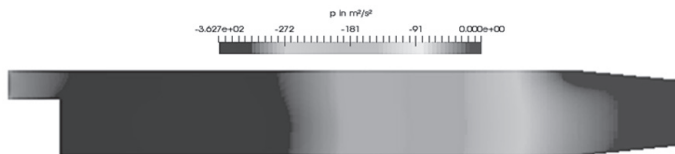


Рисунок 6 – Графическое представление стационарного поля давления. Модель  $k$ - $\Omega$ -SST.  $Re = 50\ 000$

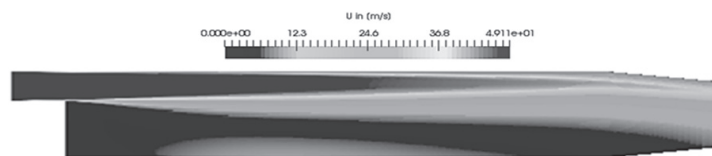


Рисунок 7 – Графическое представление стационарного поля скорости. Модель  $k$ - $\Omega$ -SST.  $Re = 50\ 000$

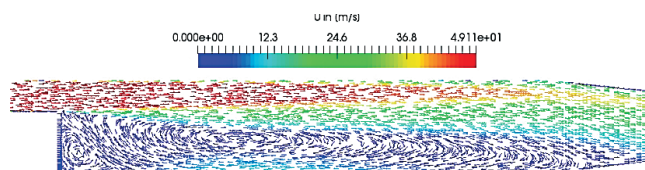


Рисунок 8 – Векторное поле скорости. Модель  $k$ - $\Omega$ -SST.  $Re = 50\ 000$

На рис. 9 и 10 представлена визуализация ламинарного и турбулентного течений соответственно.

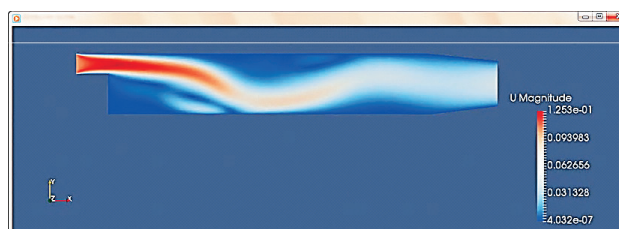


Рисунок 9 – Визуализация ламинарного течения

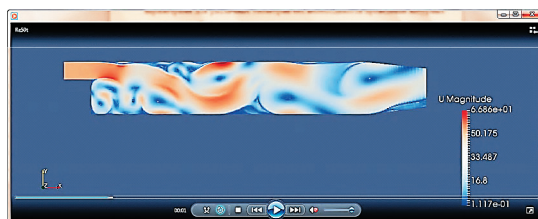


Рисунок 10 – Визуализация турбулентного течения

Результаты работы внедрены в учебный процесс кафедры медицинской и биологической физики у студентов 1-го курса лечебного, педиатрического факультетов и факультета иностранных учащихся УО ГрГМУ в лабораторные занятия по теме «Физические основы гидродинамики идеальной и вязкой жидкости. Гемодинамика и биореология» и в лекционных демонстрациях, что повышает уровень фундаментальной подготовки студентов в части восприятия характера течения жидкости по сосудам переменной геометрии с разным числом Рейнольдса. В данной работе мы хотим показать доступность методов компьютерного моделирования. Используя относительно простые модели, можно построить алгоритм для моделирования течения вязкой биологической жидкости в различных физиологических и анатомических геометриях полостей тела человека.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Лойцянский, Л. Г. Механика жидкости и газа: учебник для вузов / Л. Г. Лойцянский. – М.: Дрофа, 2003. – 840 с.
2. Официальный сайт программы OpenFOAM. URL: <http://www.openfoam.com> (дата обращения: 01.02.2019).

## TD/DFT INVESTIGATIONS OF NEW AZOMETHINE STRUCTURES FOR BIOCHEMICAL APPLICATIONS

## TD/DFT ИССЛЕДОВАНИЯ НОВЫХ АЗМЕТИНОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ ДЛЯ БИОХИМИЧЕСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ

**A. Pazniak<sup>1</sup>, S. Shahab<sup>1,2,3</sup>, M. Sheikhi<sup>4</sup>**

**Позняк А.<sup>1</sup>, Шахаб С.<sup>1,2,3</sup>, Шейху М.<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>Belarusian State University, ISEI BSU, Minsk, Republic of Belarus  
apoznk@mail.ru

<sup>2</sup>Institute of Physical Organic Chemistry National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus

<sup>3</sup>Institute of Chemistry of New Materials National Academy of Sciences of Belarus,  
Minsk, Republic of Belarus  
siyamakshahab@mail.ru;

<sup>4</sup>Young Researchers and Elite Club, Gorgan Branch, Islamic Azad University, Gorgan, Iran  
m.sheikhi2@gmail.com

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ,  
г. Минск, Республика Беларусь

<sup>2</sup>Институт физико-органической химии Национальной академии наук Беларуси,  
г. Минск, Республика Беларусь

<sup>3</sup>Институт химии новых материалов Национальной академии наук Беларуси,  
г. Минск, Республика Беларусь

<sup>4</sup>Объединение молодых исследователей при исламском университете Азад, Горган, Иран

Кантово-химическими методами смоделированы и синтезированы четыре новых азометинных соединения. Найдены и обсуждены их равновесные геометрические параметры, UV/Vis, HOMO, LUMO и электронные спектры. Рассчитаны их антиоксидантные свойства.

Four new azomethine compounds have been calculated, designed by chemical-quantum calculations and then synthesized. Their equilibrium geometric parameters, UV/Vis, HOMO, LUMO and electronic absorption spectra have been presented and discussed. Antioxidant properties of them have been calculated.

**Ключевые слова:** антиоксидантная активность, азометин, TD/DFT, оптимизация геометрии

**Keywords:** antioxidant activity, azomethine, TD/DFT, geometry optimization

Azomethines with phenyl rings isolated by an azo ( $-N=N-$ ) bond, serves as the guardian molecule for a wide class of aromatic compounds. These chromophores are adaptable atoms, and have obtained much consideration in