

2. Плетюхов, В. А. Релятивистские волновые уравнения и внутренние степени свободы / В. А. Плетюхов, В. М. Редьков, В. И. Стражев. – Минск: Беларуская навука, 2015. – 328 с.

3. Elementary Particles with Internal Structure in External Fields. Vol I. General Theory / V. V. Kisel, E. M. Ovsyuk, O. V. Veko, Y. A. Voynova, V. Balan, V. M. Red'kov. – New York: Nova Science Publishers Inc., 2018. – 404 p.

Е. В. Каленчак
(БГУИР, Минск)

Науч. рук. **А. В. Чураков**, канд. мед. наук, доцент

МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ АДРЕСНОЙ ДОСТАВКИ В ДЫХАТЕЛЬНЫХ ПУТЯХ

Дыхательные пути являются наиболее уязвимой тканью организма. Они страдают от таких заболеваний, как бронхиальная астма, хроническая обструктивная болезнь легких (ХОБЛ), пневмония и др. Кроме того в настоящий момент добавились многочисленные случаи заболеваемости COVID-19, с последствиями в виде обширных повреждений легких. Поэтому многообещающей и эффективной кажется реализация способа адресной доставки в дыхательные пути и легкие. Она позволяет усиливать местный лечащий эффект при одновременном ослаблении побочных воздействий.

Прямая легочная доставка (например, аэрозоль, ингаляторы и т. д.) представляет собой более избирательный способ доставки лекарства, являющийся неинвазивной альтернативой подкожной или внутривенной инъекциям. Вдыхание аэрозолей с лекарственными средствами уже используется для лечения многих заболеваний легких, таких как астма, инфекции и рак легких. Доступность состава с контролируемым высвобождением, который может поддерживать минимальную эффективную концентрацию конкретного лекарственного вещества, может в значительной степени снизить побочные эффекты, а также может минимизировать нагрузку на печень. Для дальнейшего улучшения эффекта препарата в легких, может быть полезно контролировать осаждение аэрозолей и целевые аэрозоли с помощью магнитного градиента поля для направления намагничивающихся аэрозольных капель, содержащих суперпарамагнитные наночастицы оксида желе-

за, в нужные области легких у мышей для уменьшения вредных побочных эффектов и повышения эффективности лечения.

Одним из важнейших параметров доставки лекарства является эффективность осаждения частиц. Она определяется процентным соотношением количества частиц, осевших на поверхности опухоли, к общему количеству частиц. Осаждение аэрозольных частиц в дыхательных путях зависит от нескольких параметров, таких как физические и гидродинамические характеристики самих частиц, скорость вдыхания, состояние здоровья человека и геометрические и морфологические детали дыхательных путей. [1]. Размер частиц также влияет на тип механизма осаждения. Значительный объем исследовательских усилий с точки зрения экспериментов и численного моделирования был направлен на определение эффективности осаждения. Для увеличения этого параметра, а также для возможности контроля траектории частиц могут использовать магнитную адресную доставку. [1]

Однако важно понимать, что на возможности доставки сильно влияют как параметры аэрозольных частиц, так и параметры турбулентного потока, образующихся в дыхательных путях. Для сокращения времени на разработку и проверку возможных решений доставки аэрозольных препаратов и нахождения оптимальных параметров для всех составляющих все чаще используют численное или компьютерное моделирование. Существует три компьютерных метода решения уравнений турбулентного потока, который образуется в дыхательных путях: прямое численное моделирование (DNS), усредненное по Рейнольдсу Навье-Стокса (RANS) и моделирование крупных вихрей (LES).

Прямое численное моделирование представляет собой решение уравнений Навье-Стокса на сетке с шагами (включая шаг по времени) достаточно малыми для точного разрешения всех турбулентных вихрей. DNS позволяет отслеживать детали мгновенных турбулентных колебаний во всех масштабах, однако весьма дорого для реализации и выходит за рамки обычного использования на современных компьютерах.

В настоящее время большинство моделей вычислительной гидродинамики (CFD) решаются только для среднего или среднего потока с использованием уравнений RANS, который подразумевает запись уравнений переноса усредненного потока (по времени), со всеми предполагаемыми масштабами турбулентности. Такой подход значительно уменьшает вычислительные ресурсы, необходимые для решения численной задачи, что приводит к огромному снижению вычис-

лительных затрат. Трудностью в применении данного метода является переход ламинарно-турбулентно-ламинарного потока в проводящих дыхательных путях, что влечет за собой необходимость уделять больше внимания подбору моделей RANS [2].

Более надежным выбором в данном случае является метод моделирования больших вихрей (LES), при котором используется альтернативный подход, в котором большие вихри решены в нестационарной постановке с использованием системы так называемых «фильтрующих» уравнений. Основным преимуществом модели LES является то, что она является более точным подходом, для решения турбулентных потоков со сравнительно небольшим числом Рейнольдса.

Несмотря на то, что вычислительных затрат LES требуется больше, чем RANS, она позволяет сохранить значительно больше элементов базовой физики турбулентности, чем RANS [3, 4], хотя и требует больших вычислительных мощностей.

Использование методов моделирования при разработке и исследовании новых аэрозольных лекарств позволяет в значительных пределах изменять множество параметров аэрозольных частиц, дыхательных путей и воздушных потоков. А комбинирование этих методов с современными программами обработки результатов расчетов, визуализации данных и дальнейшего анализа позволит получить новые обширные данные и углубленные и более детальные знания об особенностях турбулентных течений и осаждения аэрозольных частиц в дыхательных путях.

Литература

1. Koullapis, P. G. Particle deposition in a realistic geometry of the human conducting airways: Effects of inlet velocity profile, inhalation flowrate and electrostatic charge/ P. G. Koullapis [and other] // Journal of Biomechanics. – 2016. – Vol. 49, №11. – P. 2201–2212.
2. Xi, J. Transport and deposition of micro-aerosols in realistic and simplified models of the oral airway / J. Xi, P. W. Longest // Annals of Biomedical Engineering. – 2007. – №35. – P. 560–581.
3. Radhakrishnan, H. CFD modeling of turbulent flow and particle deposition in human lungs / H. Radhakrishnan, S. Kassinos // 31st Annual International Conference of the IEEE EMBS, Minnesota, USA, September 2–6, 2009. – Minnesota, USA, 2009. – P. 2867–2870.

4. Choi, J. On intra- and intersubject variabilities of airflow in the human lungs / Choi J. [and other] // Physics of Fluids. – 2009. – №21(10). – 17 p.

5. Longest, P. W. Use of computational fluid dynamics deposition modeling in respiratory drug delivery / P. W. Longest [and other] // Expert Opinion on Drug Delivery. – 2019. – №1. – P. 7-26.

6. Ruge, C. A. Pulmonary drug delivery: from generating aerosols to overcoming biological barriers – therapeutic possibilities and technological challenges / C. A. Ruge, J. Kirch, C.-M. Lehr // The Lancet Respiratory Medicine. – 2013. – Vol.1, №5. – P. 402–413.

В. А. Климович

(ГГТУ имени П. О. Сухого, Гомель)

Науч. рук. **И. А. Концевой**, ст. преподаватель

ВЛИЯНИЕ НЕОДНОРОДНОСТИ ПЕРЕОХЛАЖДЕНИЯ ФАЗОВОЙ ГРАНИЦЫ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НА ЕЕ КРИВИЗНУ

Проблема роста кристалла из переохлажденного расплава актуальна в теоретическом и прикладном аспектах. В настоящее время в экспериментальных условиях достигнуты скорости роста 20–70 м/с при глубине переохлаждения расплава до 300° К [1]. Важный аспект этой проблемы – дендритообразование и морфологические свойства фазовой границы кристаллизации (ФГК). В данной работе мы применяем уравнение роста дендрита, полученное в [2]:

$$\frac{\partial F/\partial t}{[1 + (\partial F/\partial y)^2]^{1/2}} = -\mu B [1 + (\partial F/\partial t)^2]^{-\delta/2} + \frac{\partial^2 F/\partial y^2}{\phi [1 + (\partial F/\partial y)^2]^{3/2}}. \quad (1)$$

Здесь $x = F(y, t)$ – двумерная плоская линия роста; координата x направлена вдоль оси симметрии в сторону твердой фазы; y – поперечная декартова координата, μ – кинетический коэффициент роста; B – переохлаждение ФГК на вершине дендрита; $\phi = \alpha/\mu$, $\alpha = L/(UT_c)$, L – теплота фазового перехода единицы объема вещества; U – поверхностная энергия границы раздела фаз; T_c – равновесная температура кристаллизации; безразмерный параметр $\delta > 0$ характеризует неоднородность переохлаждения ФГК вдоль линии роста. Изучим во-