

МНС

2020

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ – 2020**

**Красноярск
2020**

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 СИСТЕМ-2020

МАТЕРИАЛЫ
ДВАДЦАТЬ ТРЕТЬЕГО ВСЕРОССИЙСКОГО СЕМИНАРА
2 – 4 октября 2020 года

Красноярск 2020

УДК 001.126 (571.51) (043)

М 74

Моделирование неравновесных систем: Материалы XXIII Всероссийского семинара, / Под ред. М.Г. Садовского; отв. за вып. М.Ю. Сенашова; – Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук, 2020. –143 с.

В сборнике представлены материалы XXIII Всероссийского семинара «Моделирование неравновесных систем» (МНС–2020), проходившего в городе Красноярске 2–4 октября 2020 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 075-02-2020-1631).

Редакционная коллегия:

Садовский Михаил Георгиевич – ответственный редактор

Сенашова Мария Юрьевна – ответственный за выпуск

© ИВМ СО РАН, 2020

© Коллектив авторов, 2020

ISBN 978-5-6043558-6-2



9 785604 355862

МЕТОД КОНТРОЛЯ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ КОГНИТИВНЫХ СИСТЕМ В РЕЖИМЕ НЕРАВНОВЕСНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ

С.С. Анцыферов, К.Н. Фазилова

МИРЭА – Российский технологический университет,
Физико-технологический институт, каф. метрологии и стандартизации,
fazilova@mirea.ru

Введение

Для исследования свойств когнитивных систем (КС) в настоящее время используются методы синергетики, теории информационного поля, моделирования элементов мышления. Когнитивные системы, как самоорганизующиеся системы, обладают рядом особых свойств, в числе которых следует отметить способность функционирования в режиме неравновесной устойчивости, обеспечивающей, в свою очередь, возможность самоорганизации системы путем трансформации ее структуры. При этом одной из важных является задача контроля функционирования системы в режиме неравновесной устойчивости.

Цель работы – разработка метода контроля функционирования когнитивных систем в режиме неравновесной устойчивости.

В основу разработки метода положена ранее предложенная модель неравновесной устойчивости [1]. Данная модель предполагает вероятностную оценку эффективности структурных элементов.

Модель оценки эффективности структурных элементов в реальном масштабе времени

Для оценки эффективности предложено использовать принцип сравнительного предпочтения (рис.1), согласно которому формируется матрица попарных предпочтений (δ_{sr}) по каждому показателю эффективности (Π_i) и рассчитывается вероятностный показатель предпочтений (q_{js}), кроме того, определяется коэффициент весомости для каждого показателя эффективности (a_j). Затем вычисляется значение эффективности P_s

$$P_s = 1 - \sum_{js} q_{js} a_j, \text{ где} \quad (1)$$

$$q_{js} = \frac{(\prod_{r=1}^M \delta_{sr})^{1/M}}{\sum_{s=1}^M (\prod_{r=1}^M \delta_{sr})^{1/M}}, \quad 0 \leq q_{js} \leq 1 \quad (2)$$

$$a_j = \frac{(\prod_{s=1}^n \delta_{js})^{1/n}}{\sum_{j=1}^n (\prod_{s=1}^n \delta_{js})^{1/n}} \quad (3)$$

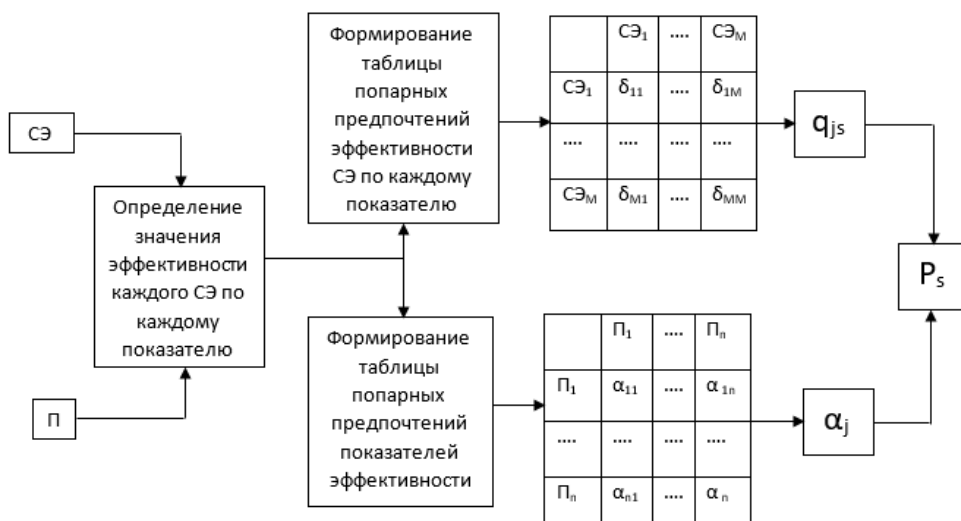


Рис. 1. Структурная схема метода оценки эффективности СЭ

Предложенный метод реализован с помощью соответствующего алгоритма, позволившего провести его численное моделирование с целью определения точности оценки эффективности структурных элементов.

Моделирование показало, что точность оценки зависит от числа СЭ (N) и от числа показателей эффективности (n) (рис. 2).

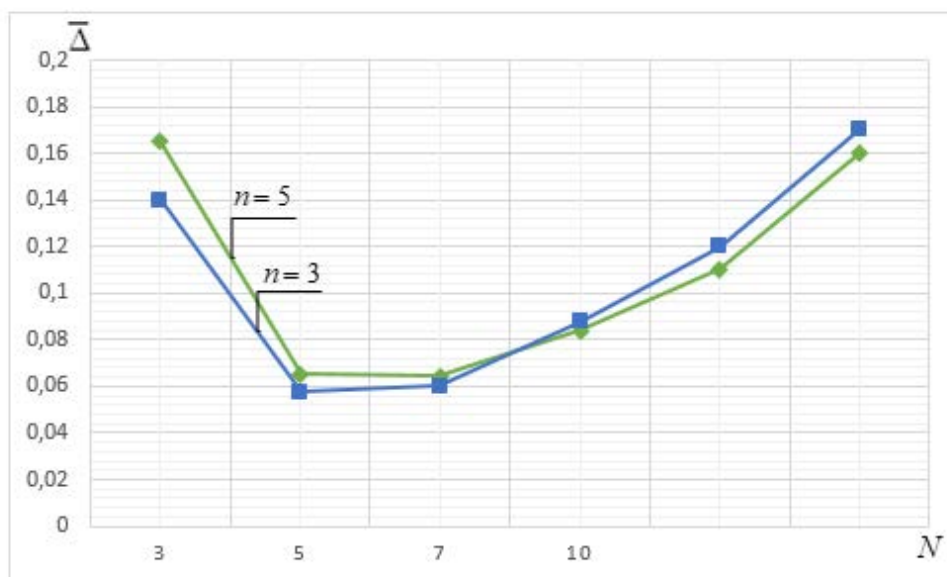


Рис.2. Точность оценки эффективности СЭ

Наиболее приемлемая по точности оценка достигается в пределах значений N от 5 до 10.

Определение областей неравновесной устойчивости

Полученные результаты позволяют определить положение областей неравновесной устойчивости в фазовом пространстве функционирования когнитивной

системы в зависимости от P , N , H , $\dot{H}$, L , где H и $\dot{H}$ – определены в [1], а $L = 1 - \frac{H}{H^*}$ – показатель избыточности системы.

В результате проделанного моделирования были определены области неравновесной устойчивости функционирования системы для $P=0,7;0,9$, $N=5;7;10$ (рис. 3, рис. 4).

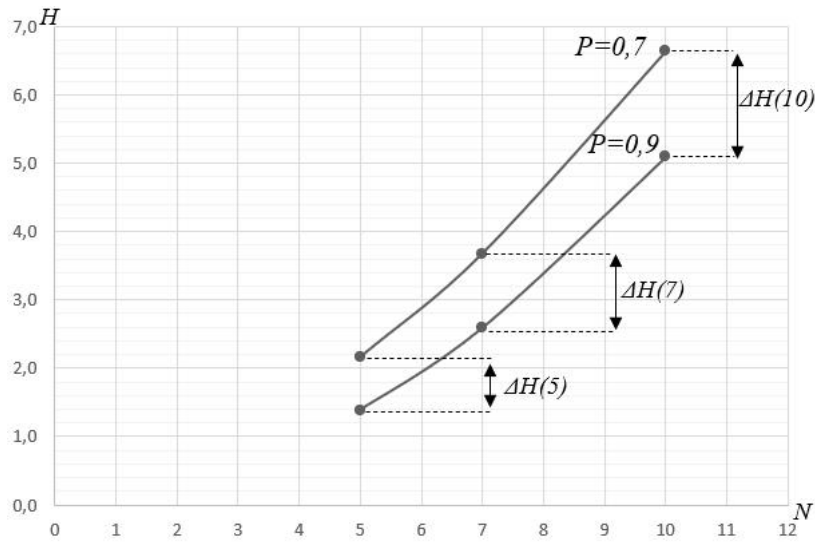


Рис.3. Зависимость энтропии системы от числа СЭ

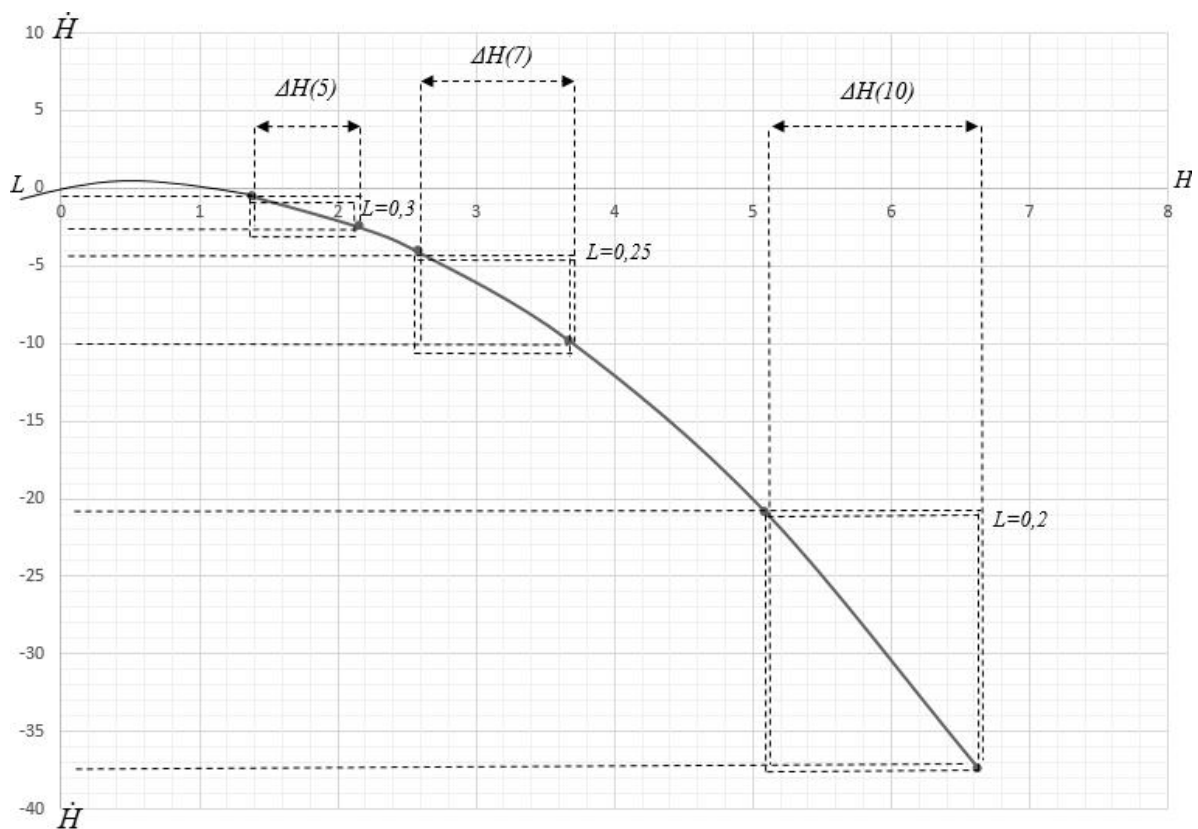


Рис.4. Положение областей неравновесной устойчивости в фазовом пространстве

Из представленных диаграмм следует, что выход за границы области неравновесной устойчивости для заданного N может быть вызван, например, снижением эффективности функционирования некоторых структурных элементов, что, в свою очередь, может нарушить условия функционирования когнитивной системы в заданном фазовом пространстве ($\Delta I > 0$, $\Delta J > 0$) и перевести ее в иное фазовое пространство. Так, если окажется, что $\Delta I > 0$, $\Delta J = 0$, то система перейдет в фазовое пространство неустойчивого функционирования (рис.5.).

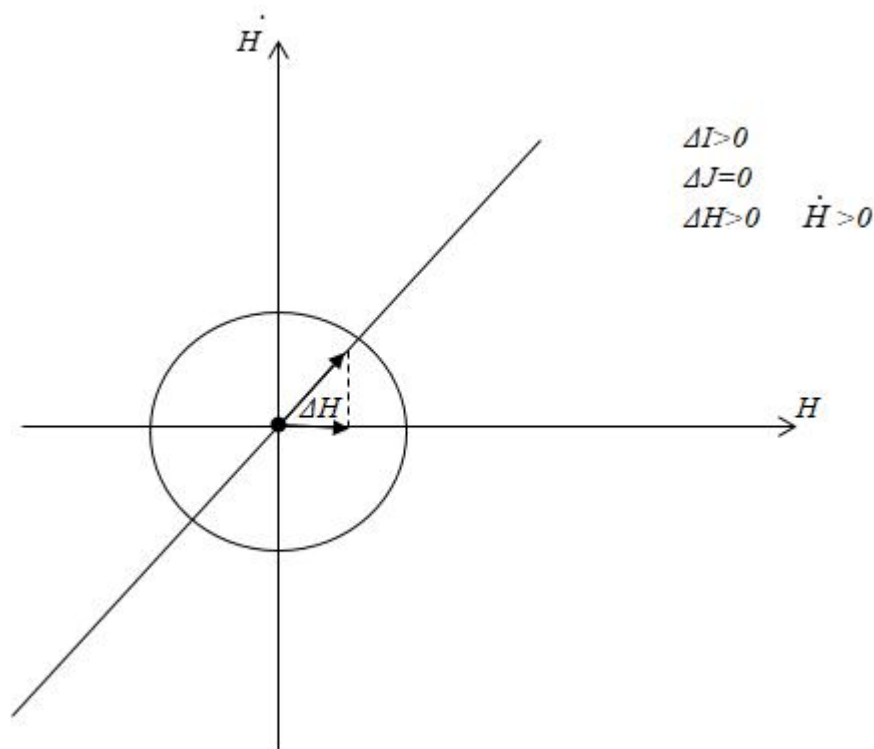


Рис.5. Фазовое пространство неустойчивого функционирования

Выводы

Предложен метод контроля функционирования когнитивных систем в режиме неравновесной устойчивости. Данный метод позволяет определить положение области неравновесной устойчивости в фазовом пространстве функционирования системы и, на основании этого, оценить, как текущее состояние системы, так и осуществить прогнозирование возможного состояния системы при выходе ее из области неравновесной устойчивости.

Список литературы

1. Анцыферов С.С. Моделирование неравновесной устойчивости когнитивных систем / С.С. Анцыферов, К.Н. Фазилова, К.Е. Русанов // Моделирование неравновесных систем: Материалы XXI Всероссийского семинара, 4–6 октября 2019 г. – Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук, 2019. – С. 3–8.

ОБРАЗОВАНИЕ ПЕРВИЧНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ ЭЛЕКТРОНАМИ В НЕРАВНОВЕСНОЙ КРЕМНИЕВОЙ СТРУКТУРЕ

Н.М. Богатов, Л.Р. Григорьян, А.В. Кленевский, М.С. Коваленко

Кубанский государственный университет, *bogatov@phys.kubsu.ru*

Введение

Радиационные дефекты изменяют физические свойства полупроводниковых структур [1 – 4]. Кроме контролируемых процессов дефектно-примесной инженерии, существуют неконтролируемые процессы образования радиационных дефектов в условиях эксплуатации, являющиеся одной из причин деградации полупроводниковых приборов [4]. Поэтому изучение процессов формирования радиационных дефектов является актуальным [5 – 7]. Влияние неравновесных условий, например, температуры, положения квазиуровня Ферми, энергии ионизирующих частиц на радиационное дефектообразование в полупроводниках обсуждалось в работах [2, 8, 9].

Теоретические и экспериментальные исследования [7, 10] показали, что число радиационных дефектов, созданных в пике Брэгга низкоэнергетическими протонами, в n^+ -слое n^+-p перехода, значительно меньше при температуре облучаемых образцов $T_p = 83$ К, чем при $T_p = 300$ К, а также много меньше, чем в p -области. Перечисленные закономерности обусловлены зависимостью процессов разделения заряженных пар Френкеля от положения квазиуровня Ферми в кремнии n - и p -типа проводимости.

Цель работы – расчет образования первичных радиационных дефектов (ПРД) электронами в кремнии в неравновесных условиях стационарного транспорта носителей заряда.

Расчет образования первичных радиационных дефектов

Концентрация неравновесных электронов n и дырок p в полупроводниках в приближении локального равновесия выражается формулами (1):

$$n = N_c e^{\frac{F_n - E_c + q\varphi}{kT}}, \quad p = N_v e^{\frac{-F_p + E_v - q\varphi}{kT}}. \quad (1)$$

В (1) N_c – эффективная плотность электронных состояний в окрестности дна зоны проводимости, F_n – квазиуровень Ферми электронов, E_c – положение дна зоны проводимости, q – элементарный заряд, φ – потенциал внутреннего электрического поля, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, N_v – эффективная плотность электронных состояний в окрестности вершины валентной зоны, E_v – положение вершины валентной зоны.

Система уравнений транспорта носителей заряда в неоднородных полупроводниках имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{j}_n = -\mu_n n \left(-\vec{\nabla} \varphi + \frac{1}{q} \vec{\nabla} E_c \right) - D_n \vec{\nabla} n + D_n n \vec{\nabla} \ln N_c, \\ \vec{j}_p = \mu_p p \left(-\vec{\nabla} \varphi + \frac{1}{q} \vec{\nabla} E_v \right) - D_p \vec{\nabla} p + D_p p \vec{\nabla} \ln N_v, \\ \frac{\partial n}{\partial t} + (\vec{\nabla}, \vec{j}_n) = G - R, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + (\vec{\nabla}, \vec{j}_p) = G - R, \\ \Delta \varphi = -\frac{q}{\varepsilon \varepsilon_0} (p - n + N_D^+ - N_A^-) \end{array} \right. \quad (2)$$

В (2) $\vec{j}_n$ – поток электронов, μ_n – подвижность электронов, D_n – коэффициент диффузии электронов, $\vec{j}_p$ – поток дырок, μ_p – подвижность дырок, D_p – коэффициент диффузии дырок, G – скорость объемной генерации, а R – скорость объемной рекомбинации электронно-дырочных пар, N_D^+ – концентрация ионизованных доноров, N_A^- – концентрация ионизованных акцепторов.

В стационарных условиях система уравнений (2) преобразуется к системе уравнений (3) для неизвестных переменных F_n , F_p , φ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\Delta F_n}{q} + \left(\left(\frac{\vec{\nabla}(F_n - E_c + q\varphi(x))}{kT} + \vec{\nabla} \ln N_c + \vec{\nabla} \ln \mu_n \right), \frac{\vec{\nabla} F_n}{q} \right) = -\frac{G - R}{\mu_n n(x)}, \\ \frac{\Delta F_p}{q} + \left(\left(\frac{\vec{\nabla}(-F_p + E_v - q\varphi(x))}{kT} + \vec{\nabla} \ln N_v + \vec{\nabla} \ln \mu_p \right), \frac{\vec{\nabla} F_p}{q} \right) = \frac{G - R}{\mu_p p(x)}, \\ \Delta \varphi = -\frac{q}{\varepsilon \varepsilon_0} \left(N_v e^{\frac{-F_p + E_v - q\varphi}{kT}} - N_c e^{\frac{F_n - E_c + q\varphi}{kT}} + N_D^+ - N_A^- \right). \end{array} \right. \quad (3)$$

В равновесии $F_n = F_p = F$, где F – уровень Ферми, принимающий постоянное значение в объеме полупроводника.

Вероятность разделения междоузельного кремния Si_i и вакансии V зависит от зарядового состояния пары. Энергетический уровень пары Френкеля в запрещённой зоне кремния расположен близко ко дну зоны проводимости $E_f = E_c - 0,07$ эВ, поэтому реализуются переходы электронов между энергетическими уровнями пары и зоны проводимости. В случае транспорта носителей заряда в формулу для вероятности заряженного состояния связанной пары Френкеля подставим F_n вместо F :

$$\omega_1 = \left[1 + g_1 \exp \left\{ \frac{F_n - E_f}{kT} \right\} \right]^{-1}. \quad (4)$$

В формуле (4) F_n является решением системы уравнений (3), $g_1 = 0,5$. Вероятность разделения нейтральной пары описывается формулой (5):

$$\omega_2 = \left[1 + \exp \left\{ -\frac{T_d - T_{dm}}{kT} \right\} \right]^{-1}. \quad (5)$$

В формуле (5) $T_d = 12,9$ эВ – пороговая энергия формирования связанной пары Френкеля, $T_{dm} = 21$ эВ – пороговая энергия формирования разделённой пары Френкеля в кремнии. Узловой атом кремния, получивший от налетающей частицы энергию $2T_{dm} \leq T_k < T_{do}$ (T_{do} – пороговая энергия образования областей разупорядочения; в кремнии $T_{do} = 20$ КэВ), покидает своё положение, перемещается в объёме кристалла. Выбитый атом передаёт энергию соседним атомам за счёт упругих столкновений, что приводит к их смещению из узловых положений и образованию каскада смещений.

Вероятность разделения связанной пары Френкеля с учётом зарядового состояния дефекта определяется величиной ω_f . Для разделённых Si $_i$ и V, расположенных в пределах сферы реакции радиусом $r_{vi} = 2,8a$ (a – период решетки), вероятность избежать аннигиляции определяется величиной ω_d :

$$\omega_f = \omega_1\omega_c + (1 - \omega_1\omega_c)\omega_2, \quad \omega_d = 6\omega_1\omega_c + (1 - 6\omega_1\omega_c)\omega_3. \quad (6)$$

В формулах (6) ω_c – дополнительный параметр, характеризующий вероятность смещения атома кремния в пространственное положение, допускающее заряженное состояние, $\omega_c = 0,00887$, а ω_3 – вероятность избежать аннигиляции для нейтральной разделённой пары Френкеля:

$$\omega_3 = \left[1 + \exp \left\{ - \frac{E^{iv} - E_m^i}{kT} \right\} \right]^{-1}. \quad (7)$$

В формуле (7) E^{iv} – энергия барьера обратного перехода, E_m^i – энергия активации миграции междоузельного кремния ($E^{iv} = 0$, $E_m^i = 0,13$ эВ).

Вероятности ω_f и ω_d (6) зависят от квазиуровня Ферми электронов F_n через ω_1 (формула (4)). Линейные скорости генерации ПРД, то есть среднее число междоузельных атомов кремния G_{Si} , вакансий G_V , дивакансий G_W , областей разупорядочения G_{do} , созданных одной ионизирующей частицей на единице длины проективного пробега, рассчитывались по формулам работ [11, 12], содержащим ω_f , ω_d . Дифференциальное сечение рассеяния релятивистского электрона рассчитывалось по формуле Мак-Кинли – Фешбаха.

На рисунке 1 показана рассчитанная зависимость линейной скорости генерации междоузельного кремния $G_{Si}(E_e, T)$ от энергии электрона E_e в интервале $[0,1; 100]$ МэВ и температуры облучения T в интервале $[20; 600]$ К. В рассматриваемых диапазонах значений E_e и T зависимость $G_{Si}(E_e, T)$ возрастает и не имеет экстремальных значений как в сечении $T = \text{const}$, так и в сечении $E_e = \text{const}$. $G_{Si}(E_e, T)$ имеет максимальное значение в точке, соответствующей $G_{Si}(100 \text{ МэВ}; 600 \text{ К}) = 1,6 \text{ см}^{-1}$.

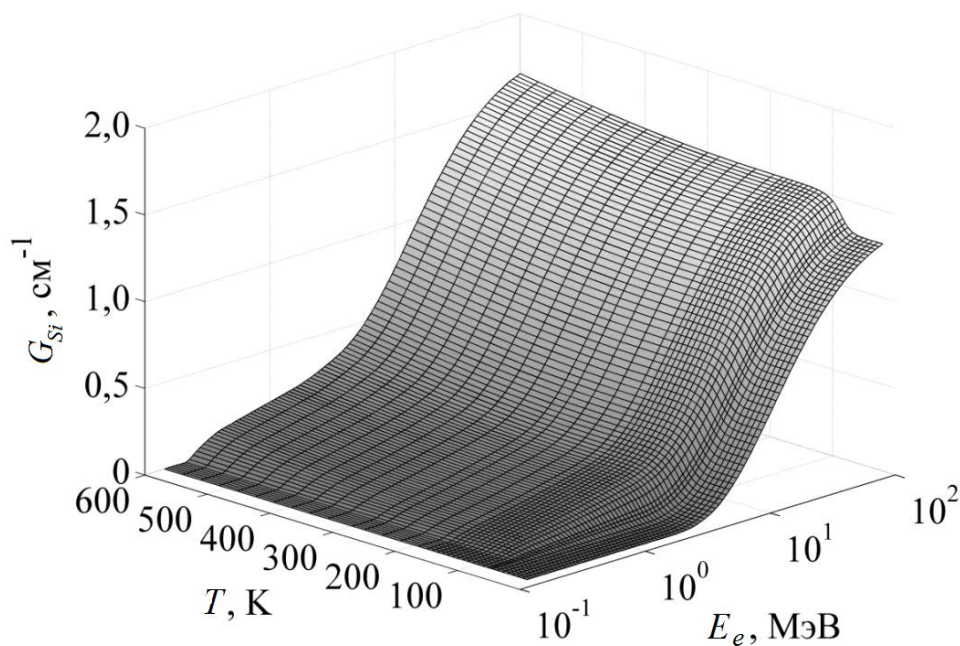


Рис.1. Зависимость линейной скорости генерации междоузельного кремния от энергии электрона и температуры облучения.

В зависимости $G_{Si}(E_e = \text{const}, T)$ наблюдаются две области роста функции. Первая область – область быстрого роста в интервале температур (76; 136) К. Вторая область – область плавного роста в интервале (136; 600) К. Эта особенность определяется характером зависимости $\omega_d(T)$.

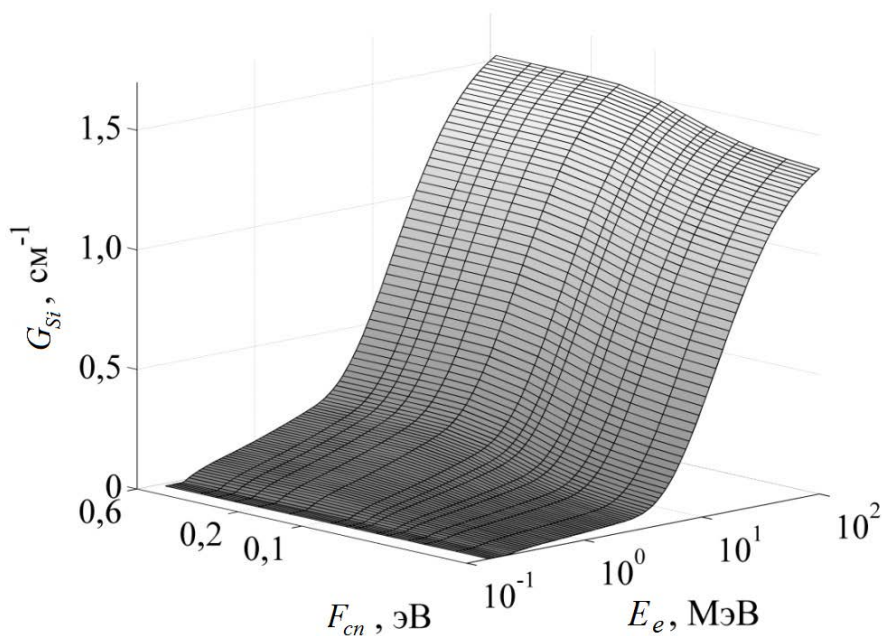


Рис.2. Зависимость линейной скорости генерации междоузельного кремния от энергии электрона и положения квазиуровня Ферми в запрещенной зоне.

Пороговые значения энергий электрона $E_{e1} = 2,22 \cdot 10^{-1}$ МэВ, $E_{e2} = 3,91 \cdot 10^{-1}$ МэВ и $E_{e4} = 15,7$ МэВ соответствуют максимальной энергии атома отдачи T_{dm} , $2T_{dm}$ и T_{do} соответственно. Пороговое значение энергии электрона $E_{e3} = 2,83$ МэВ соответствует максимальной энергии атома отдачи, при которой средний проективный пробег выбитого атома кремния $R_p = 2r_{vi}$. При $E_e > E_{e3}$ существует ядро каскада смещений объёмом $v_c > 0$.

В зависимости скорости генерации вакансий $G_V(E_e, T)$ наблюдаются закономерности аналогичные $G_{Si}(E_e, T)$. Это объясняется тем, что значения G_{Si} и G_V близки и на порядок превышают скорость генерации дивакансий G_W .

На рисунке 2 показана рассчитанная зависимость линейной скорости генерации междоузельного кремния G_{Si} от энергии электрона E_e и положения квазиуровня Ферми электронов ниже дна зоны проводимости $F_{cn} = E_c - F_n$ в диапазонах $E_e \in [0,01; 100]$ МэВ, $F_{cn} \in [0,0167; 0,56]$ эВ при температуре 300 К.

В рассматриваемых диапазонах значений E_e и F_{cn} функция $G_{Si}(E_e, F_{cn})$ возрастает и не имеет экстремальных значений как в сечении $F_{cn} = \text{const}$, так и в сечении $E_e = \text{const}$. Максимальные значения функции $G_{Si}(E_e, F_{cn})$ для всех сечений $F_{cn} = \text{const}$ наблюдаются при $E_e = 100$ МэВ.

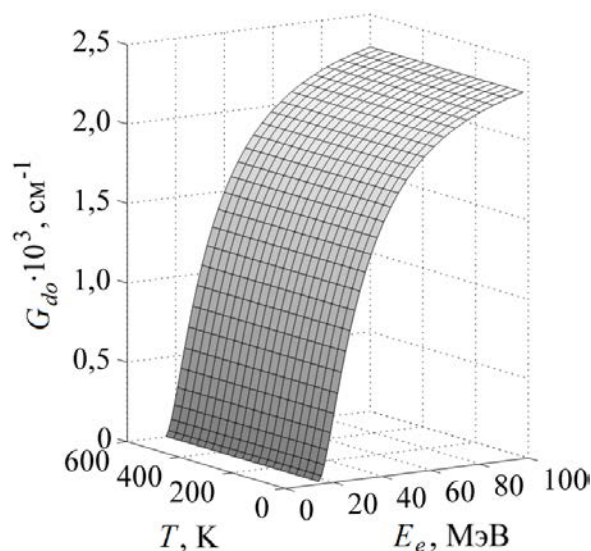


Рис.3. Зависимость скорости генерации областей разупорядочения от энергии электронов.

В зависимости, изображенной на рис.2, присутствует область интенсивного роста $G_{Si}(E_e = \text{const}, F_{cn})$ и область постоянных значений, где значение G_{Si} практически не изменяется. Интенсивный рост $G_{Si}(E_e = \text{const}, F_{cn})$ при энергиях 100 МэВ, 10,8 МэВ и 0,32 МэВ наблюдается в интервалах $F_{cn} \in [0,0167; 0,1699]$ эВ, $F_{cn} \in [0,0167; 0,1596]$ эВ $F_{cn} \in [0,0167; 0,1494]$ эВ соответственно. Расчёты зависимости линейной скорости генерации вакансий $G_V(E_e; F_{cn})$ при облучении электронами показывают закономерности, аналогичные $G_{Si}(E_e; F_c)$. Эти закономерности обусловлены

вероятностью заряженного состояния пары Si_I , V . Значения G_{Si} и G_V близки и приблизительно в 20 раз превышают скорость генерации дивакансий G_W .

Области разупорядочения при облучении электронами образуются в каскаде смещений, если $E_e > 15,7$ МэВ. Область каскада смещений характеризуется понятием «средний кластер», который приближенно имеет форму эллипсоида. Без учета эффекта каналирования средний кластер имеет вид сферы диаметром R_p , равным среднему проективному пробегу первоначально выбитого атома Si [13]. В формирующемся каскаде смещений междоузельные атомы Si_I перемещаются к границе области каскада, а V располагаются внутри области, в ядре с радиусом r_c . Часть атомов Si_I возвращается в ядро, аннигилируя с V в области характеризуемой радиусом реакции r_{vi} , а другая часть диффундирует в объеме кристалла. В результате такого взаимодействия останется ядро, являющееся областью разупорядочения. В рассматриваемой модели линейная скорость генерации областей разупорядочения не зависит от температуры и положения квазиуровня Ферми (рис.3).

Закключение

В неравновесных условиях, вызванных высоким уровнем освещенности или протеканием электрического тока через n^+ - p переход в режиме прямого электрического смещения, увеличивается концентрация электронов и дырок. Если концентрация избыточных электронов превышает концентрацию равновесных ($\Delta n > n_0$), то положение квазиуровня Ферми электронов F_n приближается ко дну зоны проводимости E_c .

Из полученных результатов следует, что при облучении электронами в той части объема кремниевой структуры, где выполняется условие $E_c - F_n < 0,2$ эВ, линейная скорость генерации G_{Si} , G_V , G_W оказывается меньше, чем в оставшемся объёме. Значения G_{Si} , G_V , G_W монотонно возрастают, как при увеличении E_e , так и при увеличении T .

Часть энергии потока электронов затрачивается на нагревание облучаемого полупроводника и на внутренний фотоэффект, в результате которого образуются электронно-дырочные пары, объёмная скорость генерации которых G входит в систему уравнений (3). Таким образом, процессы образования ПРД, тепловыделения, генерации и транспорта носителей заряда в полупроводниковых структурах являются взаимосвязанными, что требует обобщения модели радиационного дефектообразования.

Список литературы

1. Челябинский А.Р. Дефектно-примесная инженерия в имплантированном кремнии / А.Р. Челябинский, Ф.Ф. Комаров // Успехи физических наук. — 2003. — Т.173. — №8. — С. 813–846.
2. Брудный В.Н. Радиационные эффекты в полупроводниках / В.Н. Брудный // Вестник Томского государственного университета. — 2005. — №285: Серия “Физика”. — С. 95–102.

3. Соболев Н.А. Инженерия дефектов в имплантационной технологии кремниевых светоизлучающих структур с дислокационной люминесценцией / Н.А. Соболев // Физика и техника полупроводников. — 2010. — Т.44. — В.1. — С. 3–25.
4. Iles P.A. Evolution of space solar cells / P.A. Iles // Solar Energy Materials & Solar Cells. — 2001. — V.68. — I.1. — P. 1–13.
5. Kozlovski V.V. Effect of the Energy of Recoil Atoms on Conductivity Compensation in Moderately Doped n-Si and n-SiC under Irradiation with MeV Electrons and Protons / V.V. Kozlovski, A.A. Lebedev, V.V. Emtsev, G.A. Oganessian // Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B. — 2016. — V.384. — P. 100–105.
6. Kozlovski V.V. Effect of Recoil Atoms on Radiation-Defect Formation in Semiconductors under 1-10-MeV Proton Irradiation / V.V. Kozlovski, A.E. Vasil'ev, A.A. Lebedev // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. — 2016. — V.10. — I.4. — P. 693–697.
7. Агафонов Ю.А. Влияние радиационных дефектов, созданных низкоэнергетическими протонами в сильнолегированном слое, на характеристики кремниевых n^+-p-p^+ структур / Ю.А. Агафонов, Н.М. Богатов, Л.Р. Григорьян, В.И. Зиненко, А.И. Коваленко, М.С. Коваленко, Ф.А. Колоколов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2018. — №10. — С. 86–91.
8. Богатов Н.М. Образование первичных радиационных дефектов в неравновесной полупроводниковой структуре / Н.М. Богатов, Л.Р. Григорьян, М.С. Коваленко // Моделирование неравновесных систем: Материалы XXII Всероссийского семинара, 4 – 6 октября 2019 г. Красноярск. — Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН. — 2019. — С. 14 – 19.
9. Богатов Н.М. Образование первичных радиационных дефектов в неравновесной полупроводниковой структуре / Н.М. Богатов, Л.Р. Григорьян, М.С. Коваленко // Южно-Сибирский научный вестник. — 2019. — Т. 2. — № 4 (28) . — С. 199 – 203.
10. Богатов Н.М. Влияние радиационных дефектов, созданных низкоэнергетическими протонами при температуре 83 К, на характеристики кремниевых фотоэлектрических структур / Н.М. Богатов, Л.Р. Григорьян, А.И. Коваленко, М.С. Коваленко, Ф.А. Колоколов, Л.С. Лунин // Физика и техника полупроводников. — 2020. — Т. 54. — В. 2. — С. 144 – 149.
11. Богатов Н.М. Моделирование областей разупорядочения в процессе радиационного дефектообразования / Н.М. Богатов, Л.Р. Григорьян, А.В. Кленевский, М.С. Коваленко // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. — 2019. — Т.16. — №1. — С. 59 – 65.
12. Богатов Н.М. Радиационные дефекты в кремнии, выращенном методом Чохральского / Н.М. Богатов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 1999. — №3. — С. 72–78.
13. Буренков А.Ф. Таблицы параметров пространственного распределения ионно-имплантированных примесей (теория, метод расчета, таблицы) / А.Ф. Буренков, Ф.Ф. Комаров, М.А. Кумахов. — Минск: БГУ. — 1980. — 352 с.

СКОБКА ПУАССОНА И ИНТЕГРАЛЫ ДВИЖЕНИЯ В ЗАДАЧЕ ОБТЕКАНИЯ ПРОИЗВОЛЬНОГО ПЛОСКОГО КОНТУРА ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТЬЮ

Н.М. Бодунов, В.И.Халиулин

Казанский национальный исследовательский технический университет
им. А.Н. Туполева–КАИ, bodunov_nm@mail.ru, pla.kai@mail.ru

Найдены интегралы движения с применением скобки Пуассона и приведен алгоритм решения граничной задачи обтекания произвольного плоского контура вязкой несжимаемой жидкостью. В качестве искомого решения взят функциональный ряд, который находится из решения уравнения, полученного из приравнивания скобки Пуассона к нулю.

1. Скобка Пуассона и интегралы движения.

При движении любой механической системы величины q_i и $\dot{q}_i$ ($q_i, \dot{q}_i$ – обобщенные координаты и скорости, $i = \overline{1, s}$), определяющих её состояние, изменяются со временем τ . Однако существуют такие функции этих величин, которые сохраняют при движении постоянные значения, зависящие только от начальных условий. Эти функции называют интегралами движения. Интегралы движения, обладающие аддитивностью или асимптотической аддитивностью, называются законами сохранения. Для замкнутой системы с s степенями свободы существует ограниченное количество интегралов движения. Их знание является достаточным для полного решения задачи, т.е. определения состояния механической системы в любой момент времени. Интегралы движения полезны и потому, что некоторые свойства движения системы можно узнать даже без интегрирования уравнений движения.

Пусть $A(\xi, \eta, \tau)$ – произвольная функция, где $\xi = \xi(\tau), \eta = \eta(\tau)$. Тогда полная производная функции A записывается в виде

$$\frac{dA}{d\tau} = \frac{\partial A}{\partial \tau} + \frac{\partial A}{\partial \xi} \frac{d\xi}{d\tau} + \frac{\partial A}{\partial \eta} \frac{d\eta}{d\tau}. \quad (1)$$

Приняв

$$\frac{d\xi}{d\tau} = F_\eta; \quad \frac{d\eta}{d\tau} = -F_\xi, \quad (2)$$

вместо выражения (1) получим

$$\frac{dA}{d\tau} = A_\tau + A_\xi F_\eta - A_\eta F_\xi. \quad (3)$$

Уравнение (3) можно рассматривать как общий закон движения [1]. Для того чтобы величина A была интегралом движения, необходимо $A_\tau + A_\xi F_\eta - A_\eta F_\xi = 0$. Если интеграл движения не зависит от времени явно, то скобка Пуассона $[A, F]$ с функцией F обращается в нуль [2], а именно

$$[A, F] = A_\xi F_\eta - A_\eta F_\xi = 0. \quad (4)$$

При $A = LF$ скобка Пуассона примет вид

$$(LF)_\xi F_\eta - (LF)_\eta F_\xi = 0, \quad (5)$$

где L – оператор, а F – дифференцируемая функция.

Скобка Пуассона обращается в нуль, если функция F удовлетворяет также уравнениям

$$LF = kF, \quad LF = k, \quad LF = 0 \quad (k = \text{const}). \quad (6)$$

За оператор L можно принять, например, оператор Лапласа $L = \Delta$,

бигармонический оператор $L = \Delta\Delta$, оператор Даламбера и т.д. . Функциональные пространства, удовлетворяющие уравнению Лапласа, бигармоническому уравнению и другим уравнениям приведены в работах [3–6].

Скобка Пуассона определяет изменения какой-либо величины со временем. Если F – интеграл движения, не зависящий явно от времени, то скобка Пуассона равна нулю. Если аналитические решения уравнения (6) приравнять к постоянным, то получим интегралы движения ($F = \text{const}$).

Выпишем функции, удовлетворяющие уравнению Лапласа:

$$F = \xi^2 - \eta^2, F = \xi\eta, F = \xi^3 - 3\xi\eta^2, \dots$$

Зная F , из уравнений (2) найдем фазовые траектории, например, для выражения $F = \xi^2 - \eta^2$:

$$\xi = C_1 e^{2\tau} + C_2 e^{-2\tau}, \eta = -C_1 e^{2\tau} + C_2 e^{-2\tau}.$$

Константы интегрирования C_1, C_2 находятся из начальных условий. Нетрудно видеть, что $F = \xi^2 - \eta^2 = 4C_1 C_2$, т.е. $F = \text{const}$ – интеграл движения.

2. Постановка задачи и алгоритм решения граничной задачи обтекания произвольного плоского контура вязкой несжимаемой жидкостью.

Обтекание стационарным потоком вязкой несжимаемой жидкостью произвольного тела можно описать уравнением Гельмгольца [7] с соответствующими граничными условиями:

$$\Psi_y(\Delta F)_x - \Psi_x(\Delta \Psi)_y = \nu \Delta \Delta \Psi. \quad (7)$$

Здесь Ψ – функция тока.

Сделав замену переменных $\Psi = \nu F(\xi, \eta)$, $\xi = xu_\infty / \nu$, $\eta = yu_\infty / \nu$ избавимся от кинематической вязкости в уравнении (7) и запишем его в области $G = \{(\xi, \eta) : |\xi| \leq \infty, |\eta| \leq \infty\}$:

$$F_\eta(\Delta F)_\xi - F_\xi(\Delta F)_\eta = \Delta \Delta F. \quad (8)$$

Отметим, что переменные ξ и η являются местными числами Рейнольдса. Учтем, что проекции скоростей на оси выбранной прямоугольной системы координат вычисляются по формулам $\bar{u} = F_\eta$, $\bar{v} = -F_\xi$, $\bar{u} = u / u_\infty$, $\bar{v} = v / u_\infty$, u_∞ – скорость потока на бесконечном расстоянии от тела. Левая часть уравнения (8) совпадает со скобкой Пуассона (5) при $L = \Delta$, так как для макромеханики $[F, \Delta F] = [\Delta F, F]$.

Введем в рассмотрение безразмерную вихревую напряженность. При плоском течении остается только составляющая вихревой напряженности вдоль оси z , равная $\bar{\omega} = (\bar{v}_\xi - \bar{u}_\eta)$. Учитывая, что $\bar{u} = F_\eta$, $\bar{v} = -F_\xi$, $\Delta F = -\bar{\omega}$ уравнение (8), с добавлением уравнения неразрывности, запишется

$$\bar{u}\bar{\omega}_\xi + \bar{v}\bar{\omega}_\eta = \Delta \bar{\omega}, \quad \bar{u}_\xi + \bar{v}_\eta = 0. \quad (9)$$

Здесь $\bar{\omega} = \omega / \omega_0$, $\omega_0 = u_\infty^2 / \nu$.

Приближенное решение уравнения (8) ищем в виде базисных функций:

$$\tilde{F} = \sum_{\alpha=1}^N \left[A_\alpha / \alpha (c_1 |\xi| + c_0 |\eta| + d)^\alpha + B_\alpha / \alpha (c_0 |\xi| + c_1 |\eta| + d)^\alpha \right] + |\eta|, \quad (10)$$

отсюда $\bar{u} = -\sum_{\alpha=1}^N \left[A_\alpha c_0 \text{sgn} \eta / (c_1 |\xi| + c_0 |\eta| + d)^{\alpha+1} + B_\alpha c_1 \text{sgn} \eta / (c_0 |\xi| + c_1 |\eta| + d)^{\alpha+1} \right] + \text{sgn} \eta$;

$$\bar{v} = \sum_{\alpha=1}^N \left[A_{\alpha} c_1 \operatorname{sgn} \xi / (c_1 |\xi| + c_0 |\eta| + d)^{\alpha+1} + B_{\alpha} c_0 \operatorname{sgn} \xi / (c_0 |\xi| + c_1 |\eta| + d)^{\alpha+1} \right].$$

Здесь c_0, c_1 – действительные или комплексные числа, которые выбираются из физических, математических и геометрических соображений ($c_0 \neq c_1$);

$$\operatorname{sgn} \eta = \begin{cases} 1, & \text{если } \eta > 0; \\ 0, & \text{если } \eta = 0; \\ -1, & \text{если } \eta < 0, \end{cases} \quad \operatorname{sgn} \xi = \begin{cases} 1, & \text{если } \xi > 0; \\ 0, & \text{если } \xi = 0; \\ -1, & \text{если } \xi < 0. \end{cases}$$

Параметры c_0, c_1 и d задаются таким образом, чтобы при $N \rightarrow \infty$ ряд (10) равномерно сходил. Для усиления сходимости ряда (10) вместо A_{α}/α и B_{α}/α можно взять $A_{\alpha}/\alpha^{\alpha}$ и $B_{\alpha}/\alpha^{\alpha}$.

Из решения для величин $\bar{u}$ и $\bar{v}$ следует, что точка, где $\xi = 0$ и $\eta = 0$ ($\operatorname{sgn} 0 = 0$) критической точкой ($\bar{u}$ и $\bar{v}$ обращаются в нуль [8]). Начало декартовой системы координат поместим в критической точке (здесь происходит разветвление набегающего потока жидкости); ось ξ направим вдоль рассматриваемого тела по потоку, а ось η – перпендикулярно потоку. Полученные решения должны удовлетворять граничным условиям при обтекании произвольных плоских тел:

$$\bar{u}|_{\Gamma} = 0, \bar{v}|_{\Gamma} = 0, \bar{u}|_{\eta \rightarrow \infty} = 1, \bar{v}|_{\eta \rightarrow \infty} = 0. \quad (11)$$

Отметим, что на бесконечности граничные условия удовлетворяются тождественно.

При $N \rightarrow \infty$ ряды для $\bar{u}$ и $\bar{v}$ сходятся, например, по Даламберу при $d > 1$, и ограниченных $|A_{\alpha}| \leq M, |B_{\alpha}| \leq M$. Особо отметим, что найденные выражения для $\bar{u}$ и $\bar{v}$ тождественно удовлетворяют уравнению неразрывности (второе уравнение системы (9)).

Задачу обтекания произвольных плоских тел вязким потоком жидкости, занимающих замкнутую область $\tilde{G}$ будем решать методом взвешенных невязок, в частности, методом коллокации. Для этого составим невязки в области $G_1 = G \setminus \tilde{G}$ и на границе обтекаемого тела Γ , например, заданную параметрически $\Gamma = \{(\xi, \eta) : \xi = \xi(t), \eta = \eta(t)\}$:

$$-Q_{\tilde{F}} \equiv \tilde{F}_{\eta}(\Delta \tilde{F})_{\xi} - \tilde{F}_{\xi}(\Delta \tilde{F})_{\eta} - \Delta \Delta \tilde{F} \text{ в } G_1, Q_{\tilde{u}} \equiv \tilde{F}_{\eta} \text{ на } \Gamma, Q_{\tilde{v}} \equiv \tilde{F}_{\xi} \text{ на } \Gamma. \quad (12)$$

В методе взвешенных невязок предполагается, что невязки можно устремить к нулю в смысле взвешенного среднего значения:

$$\iint_{G_1} Q_{\tilde{F}} W_{\alpha} d\xi d\eta + \int_{\Gamma} Q_{\tilde{u}} W_{\alpha} ds + \int_{\Gamma} Q_{\tilde{v}} W_{\alpha} ds = 0, \quad (13)$$

где $W_{\alpha}(\xi, \eta), \alpha = \overline{(-1, N)}$ – весовые функции.

Весовые функции надо выбирать надлежащим образом. Например, в методе Галеркина весовые функции выбираются совпадающими с базисными функциями. После определения коэффициентов A_{α} и B_{α} из системы (13) найдем вихревую напряженность $\bar{\omega} = (\bar{v}_{\xi} - \bar{u}_{\eta})$. Если весовая функция имеет вид дельта-функции $W_{\alpha} = \Delta(\xi - \xi_{\alpha}, \eta - \eta_{\alpha}), \alpha = \overline{(-1, N)}$, где Δ – дельта-функция, а $\xi_{\alpha}, \eta_{\alpha}$ – координаты точек, лежащие в G_1 и на Γ , то получается формулировка метода коллокации. При решении этим методом невязки в G_1 на Γ приравниваются к нулю. Уравнения на Γ

будут линейны относительно коэффициентов A_α , а уравнения в G_1 нелинейные.

Подставим обобщенное решение (10) в уравнение (8) и далее, после сокращения нелинейных членов и упрощений получим (с учетом, что $\operatorname{sgn}^2 \eta = \operatorname{sgn}^2 \xi = 1$ при $\xi \neq 0$ и $\eta \neq 0$):

$$\begin{aligned} \operatorname{sgn} \eta \operatorname{sgn} \xi \left\{ (c_1^4 - c_0^4) \left[\sum_{\alpha=1}^N \frac{B_\alpha}{g^{\alpha+1}} \sum_{\alpha=1}^N \frac{A_\alpha (\alpha+1)(\alpha+2)}{f^{\alpha+3}} - \sum_{\alpha=1}^N \frac{A_\alpha}{f^{\alpha+1}} \sum_{\alpha=1}^N \frac{B_\alpha (\alpha+1)(\alpha+2)}{g^{\alpha+3}} \right] - \right. \\ \left. - \left[(c_1^3 + c_1 c_0^2) \sum_{\alpha=1}^N \frac{A_\alpha (\alpha+1)(\alpha+2)}{f^{\alpha+3}} + (c_0^3 + c_0 c_1^2) \sum_{\alpha=1}^N \frac{B_\alpha (\alpha+1)(\alpha+2)}{g^{\alpha+3}} \right] \right\} = \\ = (c_1^2 + c_0^2) \left[\sum_{\alpha=1}^N \frac{A_\alpha (\alpha+1)(\alpha+2)(\alpha+3)}{f^{\alpha+4}} + \sum_{\alpha=1}^N \frac{B_\alpha (\alpha+1)(\alpha+2)(\alpha+3)}{g^{\alpha+4}} \right] \text{ в } G_1, \quad (14) \end{aligned}$$

где $f = c_1 |\xi| + c_0 |\eta| + d$; $g = c_0 |\xi| + c_1 |\eta| + d$; A_α и B_α – коэффициенты, подлежащие определению.

Определив поле скоростей можно далее вычислить коэффициент полного сопротивления конкретного профиля. Из набора профилей, например, с одинаковой площадью сечения выбирается тот который наименьшее сопротивление.

В случае безвихревого обтекания тела можно показать, что понижается геометрическая размерность и граничная задача редуцируется к линейной системе уравнений.

Заключение. Предложен численно-аналитический, основанный на аппроксимации искомого решения системой базисных функций. Подстановка выбранного решения в уравнение Гельмгольца позволяет редуцировать его к нелинейной алгебраической системе, которая в виду ее структуры для ряда расчетных случаев решается аналитически. Полученные результаты могут быть использованы при решении прикладных задач гидромеханики.

Список литературы

1. Шмутцер Э. Основные принципы классической механики и классической теории поля / Э. Шмутцер. – М.: – Мир. – 1976. – 158 с.
2. Ландау Л.Д. Механика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: – Наука. – 1965. – 205 с.
3. Алексидзе М.А. Фундаментальные функции в приближенных решениях граничных задач / М.А. Алексидзе. – М.: – Наука. – 1991. – 352 с.
4. Дружинин Г.В. Базисные функции в приближенных решениях краевых задач / Г.В. Дружинин, И.М. Закиров, Н.М. Бодунов. – Казань. – ФЭН. – 2000. – 376 с.
5. Дружинин Г.В. Приближенный метод решения двумерной задачи теории упругости / Г.В. Дружинин, Н.М. Бодунов // ПМТФ. – 1999. – Т.40. – №4. – С.178-184.
6. Хохлов А.В. Решение двумерных задач теории упругости путем минимизации граничной невязки на пространстве бигармонических функций / А.В. Хохлов // ПМТФ. – 1995. – Т.59. – Вып.2. – С.232-242.
7. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя / Г. Шлихтинг. – М.: – Наука. – 1974. – 711 с.
8. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т.1 / Л.И. Седов. – М.: – Наука. – 1983. – 528 с.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ ИМПУЛЬСНОГО РЕЖИМА УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ЖИДКОСТЬ ДЛЯ УМЕНЬШЕНИЯ КАВИТАЦИИ¹

Р.Н.Голых

Бийский технологический институт (филиал) ФГБОУ ВО «АлтГТУ им. И.И.
Ползунова», romangl90@gmail.com

В большинстве химико-технологических процессов для повышения эффективности их реализации используют ультразвуковые (УЗ) колебания [1–8]. Одним из основных действующих факторов воздействия ультразвуковыми колебаниями является кавитация, при которой низкая плотность энергии распространяющейся волны трансформируется в высокую плотность энергии формируемой после схлопывания кавитационного пузырька кумулятивной струи или ударной волны. Действие кавитации позволяет ускорять многочисленные технологические процессы, связанные с изменением структуры и свойств жидких материалов.

Однако кавитация оказывает и отрицательное воздействие на протекание процессов [8]. Обусловлено это возникновением зоны парогазовых пузырьков вблизи излучателя, характеризующейся аномально высоким поглощением энергии колебаний и ограничивающей дальнейшее распространение колебаний.

Кроме того, кавитация является абсолютно недопустимой для множества процессов, где ультразвуковые колебания создают направленное стимулирующее и объединяющее воздействие [8–11]. К таким процессам относятся разрушение эмульсий, коагуляция твердых частиц (где кавитация может разрушать образованные агломераты), процессы равномерного распределения наночастиц в вязких средах, бактериальной очистки вод, брожения (где кавитация может разрушать дрожжевые бактерии), процессы разжижения натуральных веществ – например, мёда (где кавитация может оказывать отрицательное воздействие на полезные свойства).

Многократно установлено на практике, что при непрерывном синусоидальном воздействии [12, 13] возможно образование схлопывающихся кавитационных пузырьков при интенсивностях, начиная от 0,3 Вт/см² (в воде).

Тем самым невозможно вводить и распространять на большие расстояния большие энергии и эффективно реализовывать процессы, не допускающие возникновения кавитации.

Решением проблемы может стать использование для воздействия на процессы коротких ультразвуковых импульсов [14, 15], которые можно сформировать путем излучения синусоидальных колебаний, модулированных по амплитуде периодическими прямоугольными импульсами. В таком случае формируемые ультразвуковые импульсы будут представлять собой следующие друг за другом волновые пакеты конечной длительности, большей, чем период ультразвуковых колебаний, но меньшей, чем период следования пакетов (рис. 1). Ультразвуковые импульсы, как показали эксперименты [13, 16], приведут к уменьшению кавитации при той же самой суммарной вводимой акустической энергии.

¹ Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Министерства образования и науки Алтайского края в рамках научного проекта 19-48-220014 «Физические основы глубокой очистки жидкостей от нежелательных примесей наложением акустических (ультразвуковых) волновых пакетов» р_а.

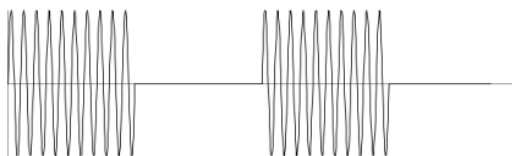


Рис. 1. Форма колебаний УЗ импульсов

Однако на сегодняшний день импульсное ультразвуковое воздействие на практике не используется из-за отсутствия достаточного научного обоснования необходимых режимов и условий реализации процесса. На сегодняшний день наиболее полно (как экспериментально, так и теоретически) исследовано ультразвуковое импульсное воздействие для случая неограниченного объема и плоской волны, когда явления отражения, интерференции и дифракционного расхождения волн не оказывают влияния на форму импульсов и, следовательно, эффективность протекания процесса [8, 13–16].

В связи с этим в работе предложена модель формирования и распространения ультразвуковых импульсов и кавитационной зоны, которая позволила обосновать эффективность ультразвукового импульсного воздействия для уменьшения кавитации в технологических объемах, близких к реальным, с учетом отражения, интерференции и дифракционного расхождения акустических волн.

Формирование и распространение ультразвуковых импульсов моделируется в цилиндрическом технологическом объеме с погруженным поршневым излучателем (рис. 2). Технологический объем имеет диаметр D , ультразвуковой излучатель имеет диаметр D_{rad} . Моделируемый технологический объем имеет абсолютно упругие стенки и заполнен жидкостью. Напротив ультразвукового излучателя расположена пористая среда, обладающая конечной упругостью и частично поглощающая колебания. Такая конфигурация имеет место быть, в частности, в различных процессах очистки жидкостей (когда ультразвук интенсифицирует разделение гомогенных бинарных или гетерогенных смесей, первоначально реализуемое с помощью адсорбента или системы мембран).

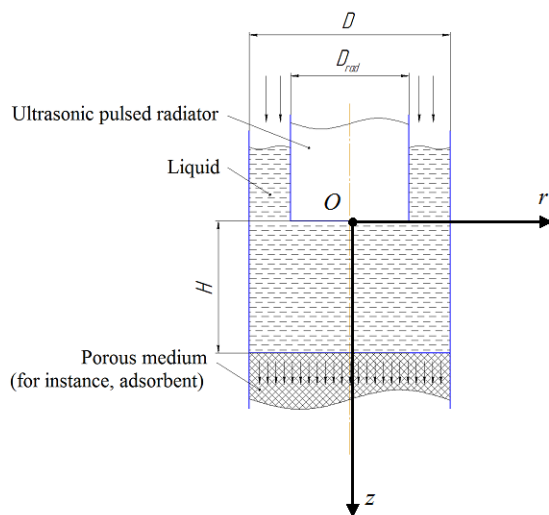


Рис. 2. Модельный технологический объем для анализа распространения ультразвуковых импульсных колебаний и формирования кавитационной области

Формирование и распространение колебаний в таком объеме описывается при помощи нестационарного волнового уравнения (1)

$$\frac{\partial^2 p}{\partial r^2}(r, z, t) + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r}(r, z, t) + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2}(r, z, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2}(r, z, t) = 0; \quad (1)$$

с граничными условиями генерации колебаний на поверхности излучателя, абсолютно упругого отражения колебаний от боковой стенки технологического объёма и отражения и поглощения колебаний на границе раздела «жидкость-пористая среда», расположенной напротив излучателя.

С учётом граничных условий волновое уравнение (1) решается путём разложения в ряд по функциям Бесселя 0-го порядка в совокупности с методом разделения переменных (2):

$$p(r, z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} x_{nm} J_0(K_m r) \operatorname{Re} \left(2P_n L_{n,m}(z) e^{-i \frac{2\pi m t}{T}} \right); \quad (2)$$

$$L_{n,m}(z) = e^{i \sqrt{n^2 \frac{\omega^2}{c^2} - K_m^2} (z-H)} + B_{n,m} e^{-i \sqrt{n^2 \frac{\omega^2}{c^2} - K_m^2} (H-z)}; \quad B_{n,m} = \frac{Z(n\omega) - \frac{n\omega}{\sqrt{n^2 \omega^2 - c^2 K_m^2}}}{Z(n\omega) + \frac{n\omega}{\sqrt{n^2 \omega^2 - c^2 K_m^2}}};$$

где x_{nm} – коэффициенты, определяемые геометрией зазора между излучателем и боковой стенкой, самого излучателя и распределением амплитуд колебаний на поверхности излучателя; K_m – коэффициенты, определяющие «нули» производной функции Бесселя 0-го порядка ($\frac{dJ_0}{dx} \left(\frac{K_m D}{2} \right) = 0$), m^{-1} ; P_n – коэффициенты разложения в

ряд Фурье для звукового давления вблизи колеблющейся бесконечной плоской поверхности при отсутствии отражателя (амплитуда колебаний данной поверхности точно такая же, как и у центра модельного поршневого излучателя)

$$p_{\text{inf}}(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(P_n e^{-i \frac{2\pi m t}{T}} + P_n^* e^{i \frac{2\pi m t}{T}} \right) = \begin{cases} \rho c \omega A \cos(\omega t), & \exists n \in Z | 0 \leq t - nT \leq \tau \\ 0, & \neg \exists n \in Z | 0 \leq t - nT \leq \tau \end{cases}, \text{ Па; } \rho - \text{плотность}$$

жидкости кг/м^3 ; c – скорость звука в жидкости, м/с ; ω – круговая частота колебаний ультразвукового излучателя, с^{-1} ; A – амплитуда колебаний центра поверхности ультразвукового излучателя, м ; T – период следования ультразвуковых импульсов, с ; t – время, с ; τ – длительность импульса, с ; $Z(\omega)$ – относительное значение механического импеданса пористой среды (относительно волнового сопротивления жидкости).

На основании найденного распределения звукового давления рассчитывалось распределение кавитационных зон (зон со схлопывающимися кавитационными пузырьками). Распределение кавитационных зон (наличие или отсутствие схлопывания пузырьков в каждой наблюдаемой точке) рассчитывалось с использованием уравнения выпрямленной диффузии [17].

Предложен метод и алгоритм решения данного уравнения, учитывающий изменения амплитуды давления с течением времени за счёт интерференции импульсов.

Получены распределения амплитуды звукового давления (рис. 3)

$$P_{\text{MAX}}(r, z) = \max_{t \in [0; T]} |p(r, z, t)|$$

и формы импульсов (рис. 4) в разных точках технологического объёма (диаметр технологического объёма – 0,08 м; высота – 0,12 м) при частоте колебаний отдельного волнового пакета, создаваемого излучателем, 22 кГц, жидкость – вода при нормальных условиях.

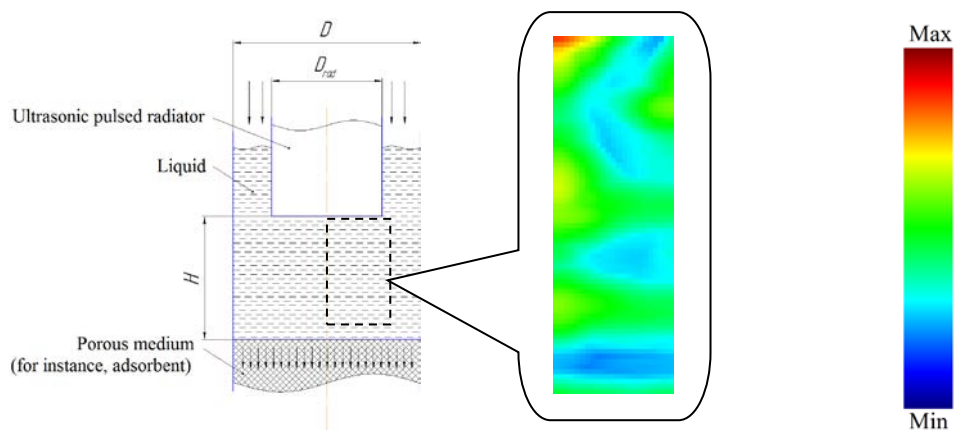


Рис. 3. Модельный технологический объём для анализа распространения ультразвуковых импульсных колебаний и формирования кавитационной области

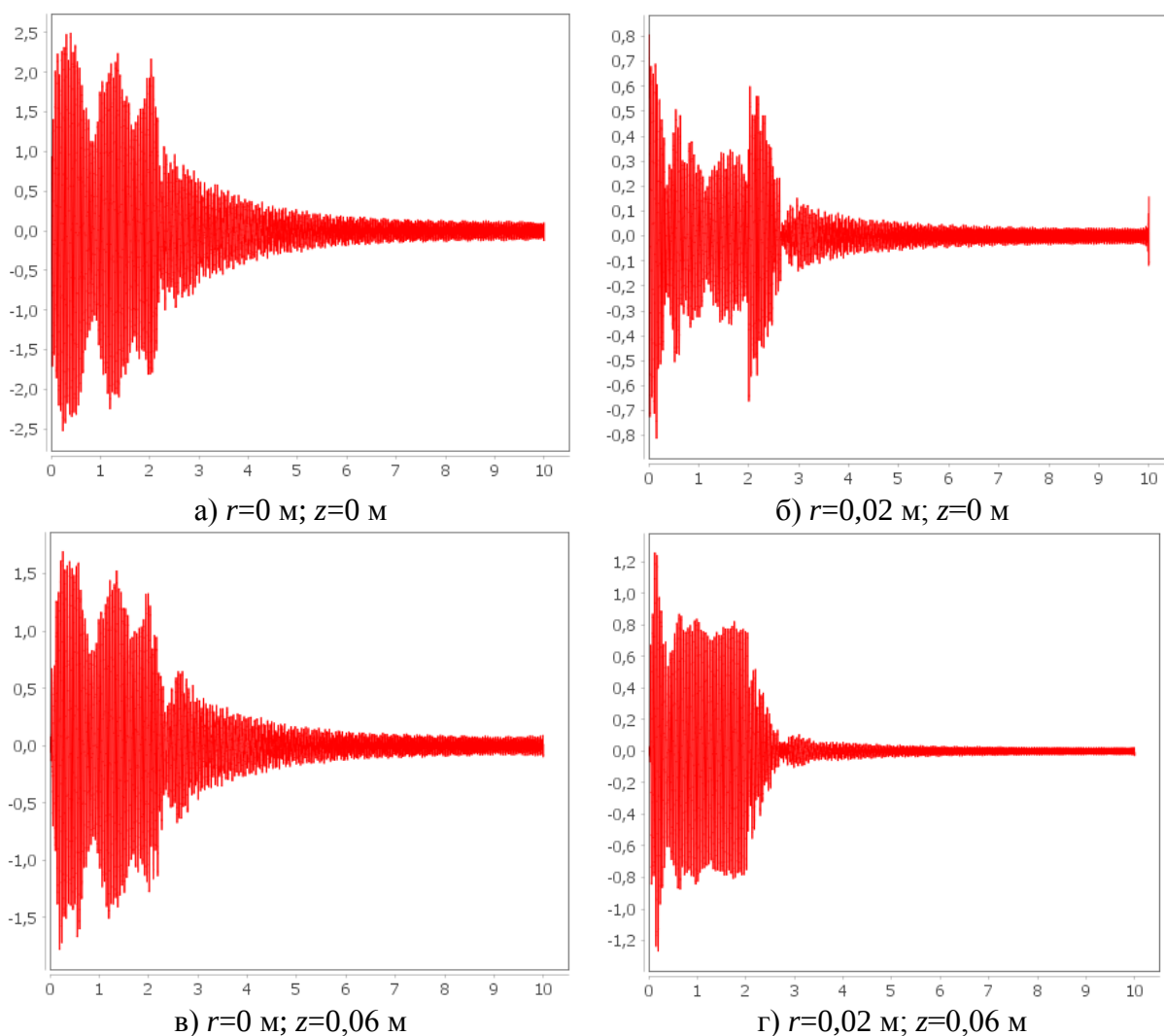


Рис. 4. Формы импульсов (зависимости относительного звукового давления от времени) в разных точках технологического объёма

Из представленных рисунков следует, что при искажении импульсов за счёт отражений и интерференции отношение максимальной величины огибающей импульса к минимальной может составлять до 10 раз и менее. Это является существенным для

скорости медленного роста пузырька за счёт выпрямленной диффузии. Т.е. пузырёк будет расти в течение всего периода следования импульсов и, следовательно, достижение размера, при котором пузырёк способен быстро расшириться и схлопнуться, возможно при меньшей амплитуде звукового давления, чем при неискажённых импульсах (рис. 1). Для объективного исследования возможности возникновения кавитации с учётом отражений и интерференции проведены расчёты распределений кавитационных зон, представленные на рис. 5.

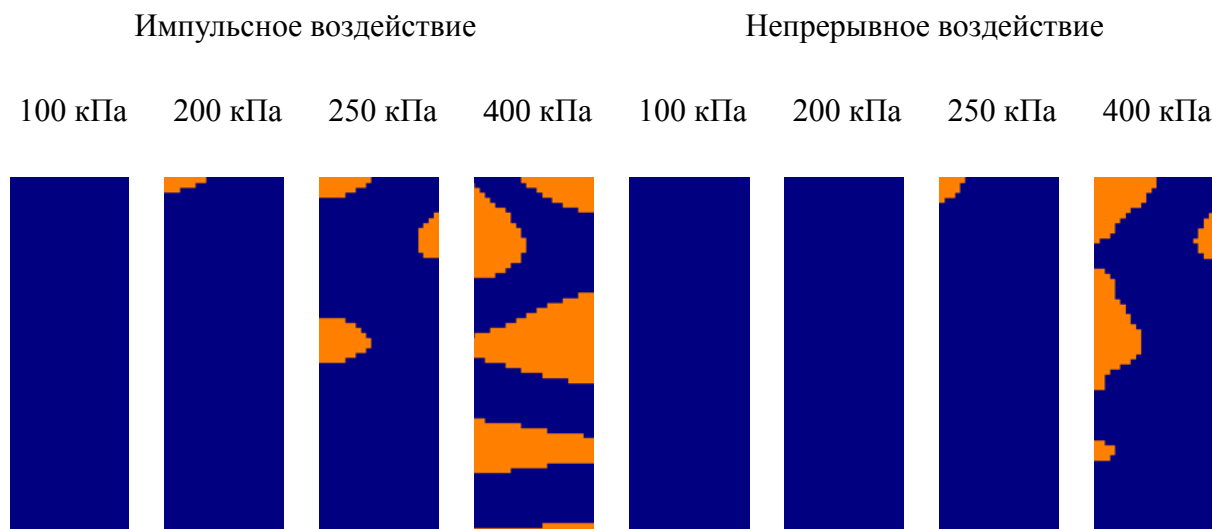


Рис. 5. Распределения кавитационных зон в технологическом объёме (синяя зона – пузырьки не схлопываются, оранжевая зона – пузырьки схлопываются) при непрерывном и импульсном воздействии и при различных максимальных амплитудах давления по всему объёму ($P_{MAX ALL} = \max_{t \in [0; T], 0 \leq r \leq \frac{D}{2}, 0 \leq z \leq H} |p(r, z, t)|$)

Представленные рисунки свидетельствуют о возможности уменьшения кавитации за счёт применения импульсного режима воздействия по сравнению с непрерывным воздействием в широком диапазоне амплитуд звукового давления в ограниченном технологическом объёме.

Это подтверждает эффективность ультразвукового импульсного воздействия в технологических объёмах, используемых на практике.

Список литературы

1. Huang, Y.D. Influence of ultrasonic treatment on the characteristics of epoxy resin and the interfacial property of its carbon fiber composites [Текст] / Y.D. Huang, L. Liu, J.H. Qiu, L. Shao // Composit. Sci. Techn., 2002. – Vol.62. – P.2153.
2. Mullakaev, M.S. Effect of ultrasound on the viscosity-temperature properties of crude oils of various compositions [Текст] / Mullakaev M.S., Volkova G.I., Gradov O.M. // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. – 2015. – Vol. 49. – No. 3. – P. 287–296.
3. Prachkin, V.G. Improving the productivity of wells by means of acoustic impact on high-viscosity oil in the channels of the face zone of a well [Текст] / Prachkin V.G., Mullakaev M.S., Asylbaev D.F. // Chemical and Petroleum Engineering. – 2015. – Vol. 50. – Issue 9-10. – P. 571–575.

4. Свиридов, Д.П. Получение устойчивых дисперсных взвесей при помощи кавитации [Текст] / Свиридов Д.П. [и др.] // Современные технологии и научно-технический прогресс. Тезисы докладов, 2008. – № 1. – С. 24–28.
5. Королёв, Е.В. Параметры ультразвука для гомогенизации дисперсных систем с наноразмерными модификаторами [Текст] / Е.В. Королёв, М.И. Кувшинова // Строительные материалы. – 2010. – № 9. – С. 60–62.
6. Измайлов, А.Ю. Совершенствование элементов теории кавитационной диспергации торфа [Текст] / А.Ю. Измайлов, К.Н. Сорокин // Сельскохозяйственные машины и технологии. – 2015. – №5. – С. 29–33.
7. Sato, K. Ultrasonic Dispersion of TiO₂ Nanoparticles in Aqueous Suspension [Текст] / K. Sato, J.-G. Li, H. Kamiya, T. Ishigaki // Journal of the American Ceramic Society. – 2008. – 91. – P. 2481–2487.
8. Голых, Р.Н. Влияние длительности ультразвукового импульса на пороговую интенсивность колебаний, приводящую к возникновению кавитации в жидкостях различной вязкости / Р.Н. Голых, Г.А. Боброва, В.Н. Хмелев, Р.В. Барсуков, Д.В. Генне, Д.С. Абраменко, В.А. Шакура, Г.А. Титов, Е.В. Ильченко // Южно-Сибирский научный вестник. – 2020. – № 2. – С. 57–61.
9. Khmelev, V.N. Studying of ultrasonic treatment effect in buckthorn wine clarification [Текст] / V.N. Khmelev, S.N. Tsyganok, R.V. Barsukov, V.P. Sevodin, E.D. Rozhnov, Y.M. Kuzovnikov, D.S. Abramenko // XII International Conference and Seminar of Young Specialists on Micro / Nanotechnologies and Electron Devices EDM 2011, Novosibirsk, NSTU. 2011. – P.265–268.
10. Xie, W. Pulsed ultrasound assisted dehydration of waste oil [Текст] / W. Xie, R. Li, X. Lu // Ultrason Sonochem, 2015. – Sep 26. – P. 136–141.
11. Khmelev, V.N. Application of ultrasonic processing devices in liquefaction of candied honey / V.N. Khmelev, S.N. Tsyganok, R.V. Barsukov, Y.M. Kuzovnikov, D.S. Abramenko // 12th International Conference and Seminar on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices, EDM'2011 - Proceedings. – 2011. – P. 269–271.
12. Хмелев, В.Н. Применение ультразвука высокой интенсивности в промышленности [Текст] / В.Н. Хмелев, А.Н. Сливин, Р.В. Барсуков, С.Н. Цыганок, А.В. Шалунов; Алт. гос. техн. ун-т, БТИ. – Бийск: Изд-во Алт. гос. техн. ун-та, 2010. – 203 с.
13. Urick, R.J. Principles of underwater sound [Текст] / R.J. Urick. – McGraw-Hill Book Co., 1983.
14. Xie, W. Pulsed ultrasound assisted dehydration of waste oil [Текст] / W. Xie, R. Li, X. Lu // Ultrason Sonochem, 2015. – Sep 26. – P. 136–141.
15. Khmelev, V.N. Pulse mode of the electronic generator of the ultrasonic technological apparatus [Текст] / V.N. Khmelev, R.V. Barsukov, G.V. Leonov, E.V. Ilchenko // International Conference of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices. – IEEE, 2014. – P. 217–220.
16. Atchley, A.A. Thresholds for cavitation produced in water by pulsed ultrasound / A.A. Atchley, L.A. Frizzell, R.E. Apfel, C.K. Holland, S. Madanshetty, R.A. Roy // Ultrasonics. – 1988. – Volume 26. – Issue 5. – P. 280–285.
17. Красильников, В.А. Введение в физическую акустику [Текст] / В.А. Красильников, В.В. Крылов – М.: Наука, 1984. — 403 с.

СТРУКТУРА НЕКОДИРУЮЩИХ ОБЛАСТЕЙ ГЕНОМОВ ХЛОРОПЛАСТОВ

И.К. Горбань¹, М.Ю. Сенашова², М.Г. Садовский²

¹Сибирский федеральный университет, ИФБиТ,

²Институт вычислительного моделирования СО РАН,

inn.gorban@gmail.com, msen@icm.krasn.ru, msad@icm.krasn.ru

Введение

Предметом изучения современной биологии являются не только сами живые организмы, но и те макромолекулы из которых они состоят. Одной из таких макромолекул является ДНК. Быстрое развитие технологий секвенирования позволило накопить большую базу геномов разнообразных живых организмов. Однако анализ этой информации всё ещё является достаточно сложным процессом.

Существует множество способов изучения генетического материала, но данная работа посвящена поиску связи между структурой генома и таксономией носителя генома. Ранее, подобные структуры уже выявлялись у бактерий [1, 2, 3, 4] и митохондрий [5].

Исследования были проведены на хлоропластах различных растений. Такой объект был выбран не случайно. Геномы хлоропластов имеют относительно небольшую длину, у высших растений имеется устоявшаяся систематика и у них отсутствует влияние различий в кодируемых функциях. Исследование хлоропластов подобными методами проводилось и ранее [6], однако данное исследование направлено на более подробный анализ именно некодирующих частей генома.

Длительное время считалось, что за большинство процессов, протекающих в клетке, ответственна лишь та часть генома, которая кодирует пептиды. Технологии протеомного и транскриптомного профилирования позволили выявить, что транскрипция заукаротического генома не ограничивается работой белок-кодирующих генов [7], некодирующая часть генома участвует как в регуляции трансляции белок-кодирующих транскриптов, так и в создании эволюционного разнообразия протеома клетки. Некодирующие элементы генома играют огромную роль в регуляции экспрессии клеточных генов [8].

Поток работ, посвящённых изучению эволюционных процессов и анализу особенностей структуры последовательностей геномов [9, 10] либо отдельных фрагментов и генов [11 – 13] хлоропластов, весьма велик. При этом часто утверждения об эволюции вида делаются на основании анализа изменений генома хлоропластов.

В данной работе мы исследовали связь определённых структур, выявляемых в некодирующих областях геномов хлоропластов, с филогенией их носителей. Под структурой мы будем понимать частотный словарь триплетов, определяемый по отдельному формально выделяемому фрагменту генома; точнее, мы будем рассматривать наборы таких словарей, определённые для семейства фрагментов, каждый из которых выделяется в геноме формально. Здесь следует сделать одно важное уточнение: если в работах [1, 2] такие фрагменты выделялись по всему геному, вне зависимости от того, кодирующим был выделяемый фрагмент генома или нет, то в рамках настоящей работы мы сосредоточимся на исследовании связи структуры частот триплетов и таксономии носителей для фрагментов, определяемых исключительно по некодирующим фрагментам генома.

Ранее [1, 2] было показано, что геномы бактерий обладают выраженной семикластерной структурой. Хлоропласты также обладают подобной структурой, однако для геномов хлоропластов выделяется не семь, а восемь кластеров [6, 14–15]. Опишем подробнее процедуру построения словарей и выявления структурированности

на их множестве. Рассматриваются генетические последовательности длины L , состоящие из символов алфавита $\aleph = \{A, C, G, T\}$. Для каждой из последовательностей составляются частотные словари толщины 3. Под частотным словарем толщины 3 будем понимать список всех троек $\omega = v_1 v_2 v_3$ идущих подряд нуклеотидов с указанием частот этих троек. Всего может быть 64 триплета. Частота f_ω — это отношение числа копий n_ω данного слова к общему числу всех триплетов N , где N — сумма всех n_ω :

$$f_\omega = \frac{n_\omega}{N}. \quad (1)$$

Триплеты внутри фрагмента определялись следующим образом: они не пересекались, но объединение всех триплетов полностью покрывало всю последовательность во фрагменте. Иными словами, рамка считывания при построении словаря W_3 смещалась на три нуклеотида, а не на один. При этом словарь W_3 задает отображение генома в 64-мерное метрическое пространство. Два генома считаются близкими, если соответствующие им точки в 64-мерном пространстве близки в смысле Евклидовой метрики.

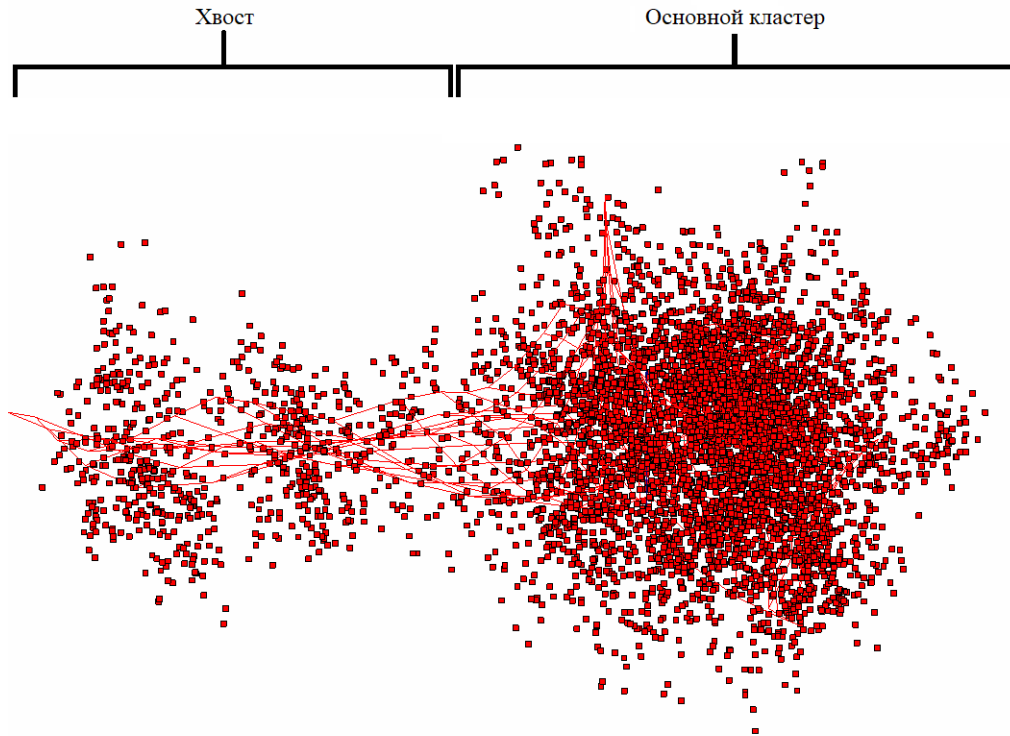


Рис. 1. Два типа фрагментов, выделяемых в структуре некодирующих участков генома, на примере генома *Hordeum vulgare subsp. Spontaneum* KC912688.

Для построения частотных словарей триплетов последовательность каждого генома сканировалась окном длины Δ с шагом t . Для каждого положения i рамки определялся участок генетической последовательности, совпадающий с рамкой считывания, для которого вычислялся частотный словарь $W_3^{(i)}$, соответствующий i -ой точке в 64-мерном пространстве. С каждой точкой в 64-мерном пространстве связывался номер центрального символа рассматриваемого участка. Номер центрального символа участка совпадает с номером этого символа в последовательности.

Результаты и обсуждение

Для исследования были использованы данные, содержащиеся в открытом доступе в базе EMBL-банка. Был отобран 391 геном хлоропластов различных растений. Для всех генетических последовательностей длина рамки считывания $\Delta = 603$, шаг $t = 11$. По полученному множеству точек строился вид данных в пространстве первых трёх главных компонент, вычисленных для данного 63-мерного пространства в программе *VidaExpert* (<http://bioinfo-out.curie.fr/projects/vidaexpert/>). Далее будем обозначать первые три главных компоненты PC_1 , PC_2 , PC_3 . После названия вида указан его номер доступа в EMBL-банке.

Было выделено пять основных структур с двумя типами кластеров, названных **основной кластер** и **хвост**. Для начала опишем кластер типа хвост: это сравнительно небольшой набор фрагментов из некодирующих областей генома, который обладает специфическими статистическими свойствами, что приводит к его выделению в явно выраженную структурную единицу, по виду действительно напоминающую рыбий хвост. Основной кластер включает в себя все остальные фрагменты и при этом имеет две различные формы: первая — это шар, вторая — своего рода линза. Эти два типа и кластер типа хвост комбинируются в различных геномах. Рис. 2 – 4 показывают упомянутые выше структуры.

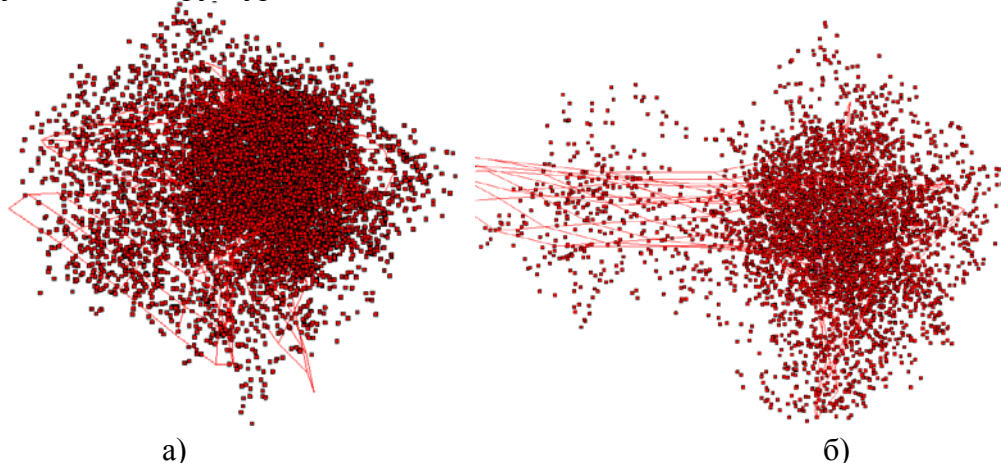


Рис. 2. Структура типа «Шар» на примере генома *Erodium chrysanthum* KJ701602 а) и типа «Шар с одним хвостом» на примере генома *Pseudotsuga sinensis* AB601120 б) в плоскости PC_1 , PC_2 .

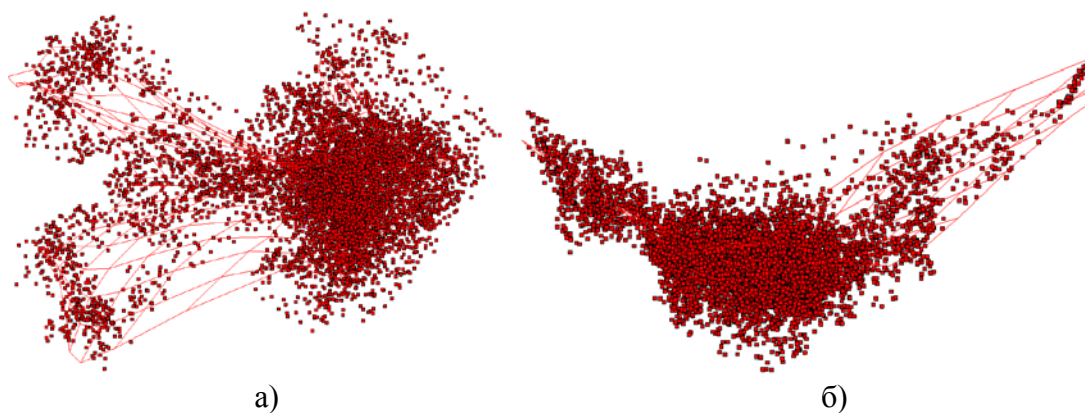


Рис. 3. Структура типа «Шар с двумя хвостами» на примере генома *Liriodendron tulipifera* DQ899947 в плоскости PC_1 , PC_2 а) и типа «Линза с одним хвостом» на примере генома *Ricinus communis* JF937588 в плоскости PC_1 , PC_3 б).

Следует отметить, что кластер **хвост** всегда находится левее основного кластера. Данное обстоятельство можно отнести на счёт произвола в выборе направления первой главной компоненты, однако выбор её направления всегда проводился системно, исключительно на основе статистических свойств частотных словарей, соответствующих формально выделяемым фрагментам. Из этого, в частности, следует, что структура некодирующих частей генома хлоропластов является по-своему консервативной: по крайней мере, взаимное расположение групп статистически заметно различающихся фрагментов, скорее всего, совпадает в геномах разных видов.

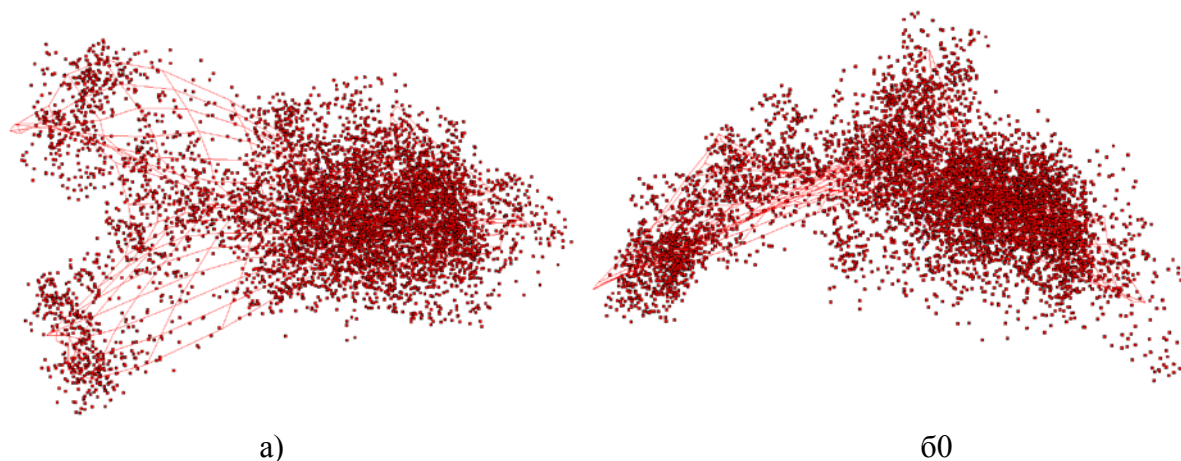


Рис. 4. Структура типа «Линза с двумя хвостами» на примере генома *Lupinus luteus* KC695666, в плоскости PC_1, PC_2 а) и плоскости PC_1, PC_3 б).

Структура типа «Шар» характеризуется шарообразным видом *основного кластера* и отсутствием *хвоста*. Структура типа «Шар с одним хвостом» характеризуется шарообразным видом *основного кластера* и наличием одного *хвоста*. Структура типа «Шар с двумя хвостами» характеризуется шарообразным видом *основного кластера* и наличием двух, чётко обособленных *хвостов*. Структура типа «Линза с одним хвостом» характеризуется сочетанием *основного кластера* и *хвоста*, в совокупности напоминающим полумесяц, обращенный дистальной, относительно центра, стороной вверх или вниз. Эта структура проявляется лишь в плоскости PC_1, PC_3 . В плоскости PC_1, PC_2 структура выглядит как шар с одним *хвостом*. Структура «Линза с двумя хвостами» характеризуется сочетанием *основного кластера* и *хвоста*, в совокупности напоминающим полумесяц, обращенный дистальной, относительно центра, стороной вверх или вниз. Аналогично, этот вид проявляется лишь в плоскости PC_1, PC_3 , в плоскости PC_1 структура выглядит как шар с двумя *хвостами*.

Перейдём теперь к обсуждению тех структур, которые можно выделить в ансамблях формально выделяемых фрагментов, принадлежащих разным видам, в случае одновременной кластеризации таких геномов. Для того, чтобы показать, что целостность структуры проявляется не только в каждом отдельно взятом геноме, но и в их множестве, была построена общая структура для 10-ти геномов. Множество точек, принадлежащее каждому из геномов, окрашивалась в отдельный цвет (см. Рис.5). В большинстве случаев объединение некодирующих участков 10-ти произвольно взятых геномов хлоропластов, разделённых на формально выделяемые фрагменты, как описано выше, порождали структуру «линза с двумя хвостами»; типичный пример такой структурированности показан на Рис.5.

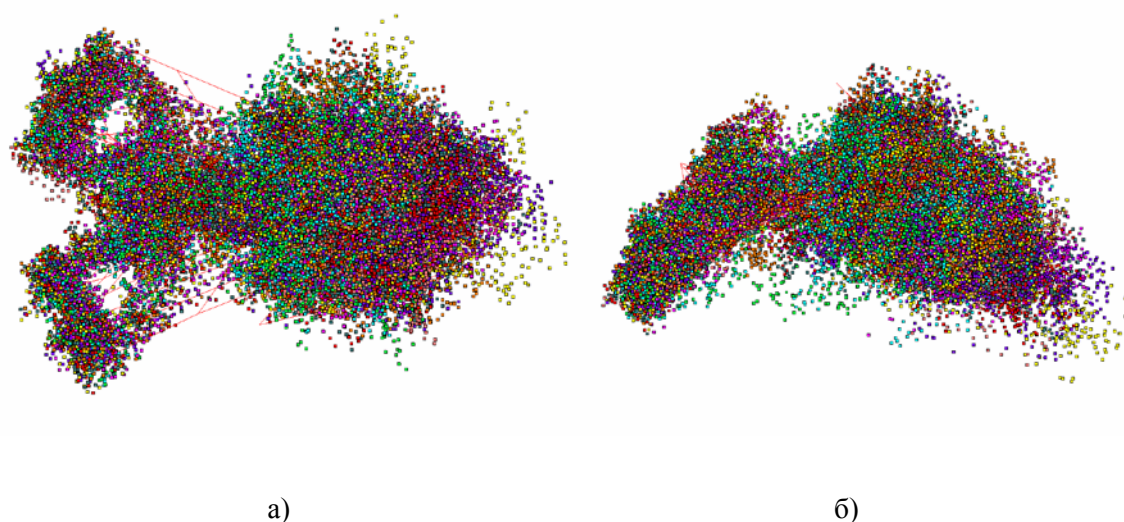


Рис. 5. Объединённая структура геномов *Genlisea margaretae* (HG530134), *Schwalbea americana* (HG738866), *Pinguicula ehlersiae* (HG803178), *Orobanchе gracilis* (HG803179), *Ptilidium pulcherrimum* (HM222519), *Magnolia kwangsiensis* (HM775382), *Jacobaea vulgaris* (HQ234669), *Mankyua chejuensis* (JF343520), *Sesamum indicum* (JN637766) и *Vaccinium macrocarpon* (JQ248601) в плоскости PC_1 , PC_2 а) и плоскости PC_1 , PC_2 б).

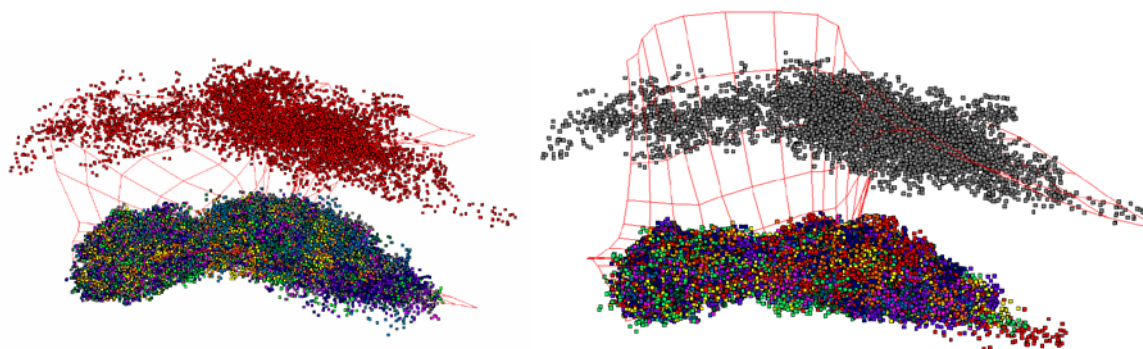


Рис. 6. Некодирующий геном хлоропластов *Allium cepa* (окрашен в красный цвет, KF728079) выделяется на фоне не кодирующих геномов хлоропластов других растений. Рисунки отличаются разными наборами геномов, формирующих общий кластер.

Однако среди всех геномов выделяется группа из геномов 9 видов, которые ведут себя принципиально иначе, в пространстве частот триплетов, определяемым по формально выделяемым фрагментам в не кодирующих областях геномов; это поведение показано на Рис.6. Поясним сказанное. Для этого обратимся к Рис.5. На этом рисунке хорошо видно, что фрагменты не кодирующих участков геномов различных организмов плотно вложены друг в друга и образуют структуру типа «линза с двумя хвостами», что отчётливо видно по расположению различно окрашенных точек.

При этом очевидно, что никакими методами кластеризации выделить индивидуальные подгруппы фрагментов, принадлежащие только одному виду, не удастся. Не вызывает сомнения тот факт, что кластеризация структуры типа той, что представлена на Рис.5 методом динамических ядер приведёт к построению какой-то классификации. Эта классификация может оказаться устойчивой или неустойчивой,

классы, выделяемые ею, могут оказаться различимыми или неразличимыми, но в любом случае ожидать того, что в один класс попадут точки, соответствующие фрагментам одного вида, не приходится.

Противоположная картина наблюдается для ряда организмов; пример представлен на Рис.6. Было выявлено 9 видов растений, геномы хлоропластов которых формируют ярко выраженный отдельный кластер от остальных геномов. Они принадлежали таким видам как: *Allium cepa* (KF728079), *Angiopteris evecta* (DQ821119), *Anthoceros angustus* (AB086179), *Brachypodium distachyon* (EU325680), *Cycas revoluta* (JN867588), *Equisetum arvense* (GU191334), *Ginkgo biloba* (AB684440), *Larix decidua* (AB501189), *Pseudotsuga sinensis*. Для всех этих видов было обнаружено, что их формально выделяемые фрагменты формируют отдельный кластер, который наверняка будет выделять любым методом кластеризации — от метода динамических ядер до топологических методов. Обращает на себя внимание также тот факт, что в этом списке видов присутствуют виды самых разных таксонов высокого уровня. Причины столь необычного поведения этих видов требуют отдельного изучения.

Заключение

Для всех рассмотренных в данной статье геномов хлоропластов установлено, что структура распределения формально выделяемых коротких фрагментов из некодирующих областей генома в пространстве первых трёх главных компонент, определяемых для частотных словарей триплетов, очень похожа: имеется центральное ядро и один или два «хвоста». Всего выделяется пять различных структур, отличающихся формой распределения, а также наличием или отсутствием кластера «хвост». Все эти структуры выделяются при индивидуальном анализе геномов, каждого вида отдельно. Анализ структуры, получаемой при совместном распределении формально выделяемых фрагментов, представляющих несколько разных видов, показывает, что большая часть этих видов формирует структуры, которые не могут быть разделены на кластеры со значимым преобладанием фрагментов от генома одного вида; точнее, группирование фрагментов одного и того же вида легко идентифицируется в такой структуре, однако оно не может быть выделено методами кластеризации. При этом девять видов полностью выделяются из указанной схемы: при построении совместного с ними распределения фрагменты этих видов полностью обособляются от остальных и формируют кластер, который может быть устойчиво и различимо выделен любыми методами кластеризации.

Список литературы

1. Gorban A. N., Zinovyev A. Y., Popova T. G. Seven clusters in genomic triplet distributions //In silico biology. – 2003. – Т. 3. – №. 4. – С. 471-482.
2. Gorban A., Popova T., Zinovyev A. Codon usage trajectories and 7-cluster structure of 143 complete bacterial genomic sequences //Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2005. – Т. 353. – С. 365-387.

3. Сенашова М. Ю., Садовский М. Г. Пространственная структура геномов цианобактерий //Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2017. – №. 11-2. – С. 255-259.
4. Горбань И. К., Густов В. С., Сенашова М. Ю, Садовский М. Г. Структура геномов цианобактерий для разной толщины словарей //Нейроинформатика, её приложения и анализ данных. – 2019. – С. 31-36.
5. Косарев Р. Е., Сенашова М. Ю., Садовский М. Г. Пространственная структура митохондриальных геномов растений и животных //Нейроинформатика, её приложения и анализ данных. – 2019. – С. 58-66.
6. Садовский М.Г., Сенашова М.Ю., Малышев А.В. Chloroplast Genomes Exhibit Eight-Cluster Structuredness and Mirror Symmetry // LNBI, vol.10813, 2018, pp.186 – 196.
7. Патрушев Л. И., Минкевич И. Г. Проблема размера геномов эукариот //Успехи биологической химии. – 2007. – Т. 47. – С. 293-370.). Согласно результатам исследований (Lin L. et al. The contribution of Alu exons to the human proteome //Genome biology. – 2016. – Т. 17. – №. 1. – С. 1-14.
8. Патрушев Л. И., Коваленко Т. Ф. Функции некодирующих последовательностей генома млекопитающих //Успехи биологической химии. – 2014. – Т. 54. – С. 39-102.
9. Leliaert F., Smith D.R., Moreau H., Herron M.D., Verbruggen H., Delwiche Ch.F., De Clerck O., 2012. Phylogeny and Molecular Evolution of the Green Algae // Critical Reviews in Plant Sciences. V. 31. P. 1-46.
10. Carbonell-Caballero J., Alonso R., Ibanez V., Terol J., Talon M., Dopazo J., 2015. A phylogenetic analysis of 34 chloroplast genomes elucidates the relationships between wild and domestic species within the genus citrus // Molecular Biology and Evolution. V. 32. № 8. P. 2015--2035.
11. Milanowski R., Zakrys B., Kwiatowski J., 2001. Phylogenetic analysis of chloroplast smallsubunit rRNA genes of the genus Euglena Ehrenberg // International Journal of Systematic and Evolutionary Microbiology. V. 51. P. 773-781.
12. Dong W. , Liu J., Yu J., Wang L., Zhou Sh., 2012. Highly Variable Chloroplast Markers for Evaluating Plant Phylogeny at Low Taxonomic Levels and for DNA Barcoding // PLoS ONE. V. 7. № 4. P. 1-9.
13. Marazzi B., Endress P.K., De Queiroz L.P., Conti E., 2006. Phylogenetic relationships within senna (*Leguminosae*, *Cassiinae*) based on three chloroplast dna regions: patterns in the evolution of floral symmetry and extrafloral nectaries // American Journal of Botany. V. 93. № 2. P. 288-303.
14. Садовский М.Г., Сенашова М.Ю., Малышев А.В. Восьмикластерная структура геномов хлоропластов наземных растений // ЖОБ. 2018, т.79(2), С.124 – 134.
15. Садовский М.Г., Сенашова М.Ю., Путинцева Ю.А. Eight Clusters, Synchrony of Evolution and Unique Symmetry in Chloroplast Genomes: The Offering from Triplets. B: Chloroplasts and Cytoplasm: Structure and Functions (ser. Cell Biology Research Progress), Eds. Carl Dejesus and Lourdes Trask, 2018, Nova Science Publishers, Inc., N.-Y., pp.25 – 95.

ВЗАИМОСВЯЗЬ АНТРОПОМЕТРИЧЕСКИХ И БИОИМПЕДАНСОВЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ФИЗИЧЕСКОГО РАЗВИТИЯ С ПОСЛЕОПЕРАЦИОННЫМИ ОСЛОЖНЕНИЯМИ У БОЛЬНЫХ РАКОМ ЖЕЛУДКА

Е.А. Горбунова^{1,2}, Н.Н. Медведева¹, М.Г. Садовский^{1,3}, Р.А. Зуков^{1,2}

¹ФГБОУ ВО «Красноярский государственный медицинский университет
им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого» Минздрава России

²КГБУЗ «Красноярский краевой клинический онкологический диспансер
им. А.И. Крыжановского»

³Институт вычислительного моделирования СО РАН

opium-100@yandex.ru, medvenad@mail.ru, msad@icm.krasn.ru, zukov_rus@mail.ru,

Введение

Рак желудка (РЖ) является актуальной проблемой современной медицины. На сегодняшний день в мире зарегистрированы высокие показатели заболеваемости и смертности от данного заболевания. Количество впервые выявленных случаев РЖ в 2018 году по данным ВОЗ составило более 1 миллиона [1]. В структуре общей онкологической заболеваемости РЖ занимает устойчивое 5 место, а в структуре смертности от онкологических заболеваний — 3 место [1]. Несмотря на достижения современной медицины, ежегодно в мире от РЖ продолжают погибать около 800000 человек. Стандартизированные по возрасту показатели заболеваемости у мужчин в 2 раза выше, чем у женщин. Более половины впервые выявленных случаев заболевания РЖ зарегистрировано в странах Азии (75,4 %) [1]. В России ежегодно выявляется около 35000 новых случаев заболеваемости РЖ, при этом у большинства пациентов заболевание диагностируется на стадии местного и отдаленного распространения (III стадия — 22,9 %, IV стадия — 39,9 %) [2].

Основными этиологическими факторами развития РЖ являются: хронический атрофический гастрит, ассоциированный с инфицированием *Helicobacter pylori*; инфицирование вирусом Эпштейн – Барр; неправильное, несбалансированное питание; ожирение; резекция желудка в анамнезе; генетические факторы, в частности синдром наследственного рака желудка диффузного типа, пернициозная анемия, наследственные синдромы, сопровождаемые полипозом желудочно-кишечного тракта; предраковые заболевания и изменения слизистой оболочки желудка, такие как аденоматозные полипы желудка, болезнь Менетрие, дисплазия желудочного эпителия, кишечная метаплазия [3,4].

Основным методом лечения РЖ на сегодняшний день является оперативное вмешательство [5], достаточно часто сопровождающееся экстра- и интраабдоминальными осложнениями, обусловленными различными факторами, в том числе белково-энергетической недостаточностью (нутритивной недостаточностью) [6]. Частота развития нутритивной недостаточности при раке желудка около 75 – 80% по данным различных авторов [7]. Это сложный мультифакториальный синдром, клиническим проявлением которого является прогрессирующая потеря в весе. Развитие недостаточности питания при раке желудка обусловлено различными факторами, такими как, клинические проявления заболевания: отсутствие аппетита, тошнота, рвота, опухолевый стеноз желудка и изменения метаболизма, преобладание процессов катаболизма, повышенного распада белка. В результате развития нутритивной недостаточности снижается общая выживаемость, ухудшаются непосредственные и отдаленные результаты хирургического лечения, замедляется заживление послеоперационных ран, повышается риск развития послеоперационных гнойно-

воспалительных и тромбоэмболических осложнений, снижается переносимость последующей химиотерапии, страдает качество жизни пациентов [8, 9].

Для определения причин и времени развития болезни в медицине используются биомаркеры, которые характеризуются количественно и легкодоступны в использовании. Биомаркер — это чётко определяемое событие, происходящее в биологической системе, в частности, в организме человека, как правило, имеющее числовое выражение и интерпретируемое как отражение общего состояния организма, как индикатор здоровья или риска возникновения заболевания. Коллективом учёных ФГБОУ ВО «Красноярский государственный медицинский университет имени профессора В.Ф. Войно-Ясенецкого» Минздрава России в результате выполнения государственного задания «Система маркеров для оценки соматонейропсихологического статуса здорового человека» определены следующие маркеры физического статуса здорового человека: индекс массы тела; индекс полового диморфизма (ИПД) J.M. Tanner; индекс W.L. Rees — H.J. Eyseck; абсолютная и относительная жировая масса тела; уровень основного обмена; величина фазового угла; коэффициент скорости старения [10].

Коррекция недостаточности питания у больных раком желудка, борьба с послеоперационными осложнениями, улучшение результатов лечения являются актуальными проблемами в лечении рака желудка на сегодняшний день [11]. Изучение антропометрических и биоимпедансометрических показателей физического развития пациентов с раком желудка представляет интерес с точки зрения практической медицины. Полученные данные можно использовать в клинической практике на этапе всеобщей диспансеризации населения для выявления групп повышенного риска развития рака желудка.

Целью данной работы является выявление и анализ связей между значением ИМТ, конституциональным типом пациентов (по индексу полового диморфизма, J.M. Tanner), показателями компонентного состава тела человека (данные биоимпедансометрии) и послеоперационными осложнениями у больных РЖ.

Материалы и методы

В исследование включено 250 пациентов с верифицированным раком желудка, 123 мужчины и 127 женщин. Проводилось антропометрическое и биоимпедансометрическое обследование пациентов, получавших оперативное лечение в период с 2016 по 2018 годы на базе отделения онкоабдоминальной хирургии КГБУЗ «Красноярский краевой клинический онкологический диспансер им. А. И. Крыжановского». В настоящей работе для скрининга нутритивной недостаточности использована шкала NRS 2002 (Nutritional Risk Screening 2002), которая была рекомендована ESPEN (European Society for Clinical Nutrition and Metabolism), (Европейское общество парентерального и энтерального питания) [12].

Антропометрическое обследование включало определение длины, массы тела, диаметров плеч, грудной клетки и таза, окружностей (обхватов) талии и бедер. Обследование проводили с помощью ростомера, напольных весов, толстотного циркуля, сантиметровой ленты.

Расчёт индекса массы тела (ИМТ) проводился следующим образом. Для определения ИМТ использовался индекс Кетле-II. ИМТ рассчитывался по формуле: $I = P/L^2$, где I — ИМТ, P — масса тела, кг, L — длина тела, см, и был интерпретирован в соответствии с рекомендациями ВОЗ (1997).

Для определения пропорциональности телосложения использован метод определения полового диморфизма по индексу J.M. Tanner (1951), который

рассчитывался по формуле: $3 \times$ биакромиальный диаметр (диаметр плеч) - биксритальный диаметр (диаметр таза) с последующим определением морфотипа [13].

Объективная оценка состава тела на основе электрических свойств организма произведена с использованием биоимпедансного анализа на аппаратно-программном комплексе АВС-01 «Медасс» (научно-технический центр «Медасс», г. Москва) с помощью персонального компьютера, многоцветных посеребренных электродов (Россия), одноразовых биоадгезивных электродов ShillerBiotabs с покрытием из серебра и площадью контактной площадки 528 мм².

В основе работы аппарата лежит биоимпедансный анализ — метод оценки абсолютных и относительных значений компонентов состава тела, основанный на измерении параметров электрического сопротивления. Наиболее распространенная методика БИА предусматривает измерение сопротивлений между запястным и голеностопным суставами. Биоимпедансный анализатор позволяет получить достоверную информацию о составе тела: жировая масса, нормированная по росту (кг), тощая масса (кг), активная клеточная масса (кг), доля активной клеточной массы в процентах, скелетно-мышечная масса (кг), доля скелетно-мышечной массы в процентах, удельный основной обмен (ккал/м²/сутки), общая жидкость организма (кг), внеклеточная жидкость (кг), основной обмен (ккал/сутки). Аппарат также позволяет определить величину фазового угла, который характеризует емкостные свойства биологических мембран и жизнеспособность тканей. Измерения проводились с частотой 50 кГц. В качестве электродов использованы многоцветные посеребренные электроды. Значения, полученные в результате использования многоцветных электродов, не отличались от значений, полученных при использовании одноразовых. Рассчитать величину фазового угла можно самостоятельно по значениям реактивного и активного сопротивления по формуле: $\varphi = \arctg (X_c/R)$, где X_c — реактивное сопротивление, R — активное сопротивление. Именно фазовый угол отражает состояние клеточного метаболизма и общее состояние человека. Величина фазового угла коррелирует с тяжестью состояния пациентов, прогнозом заболевания и является индикатором состояния здоровья.

На дооперационном этапе у 50-ти пациентов с раком желудка (группа сравнения) нутритивная поддержка производилась с использованием сипинга. В качестве препаратов для энтерального питания использовались жидкие готовые смеси: Нутридринк компакт протеин, 18 г белка и 300 ккал в 125 мл, по 250 мл в сутки в течение 14 дней до операции (производитель Nutricia Advanced Medical Nutrition, Нидерланды). В контрольной группе (n=200) пациенты получали нутритивное питание (энтеральное зондовое, парентеральное) только на этапе интенсивной терапии в послеоперационном периоде (стандартный подход в клинике).

Все полученные клинические данные обрабатывались двумя группами методов: линейной статистикой и нелинейной. Обработка линейной статистикой включала в себя проведение описательной статистики полученных данных. Обсудим подробнее применённый в настоящей работе метод упругих карт — новый метод понижения размерности многомерных данных, нелинейной кластеризации и их визуализации. Для начала подчеркнём одну важную особенность используемого метода: если классическая статистика (и традиционный подход в медицинских исследованиях) подразумевают формулировку гипотезы исследования (формально осуществляемую на доэкспериментальной стадии) с последующей её проверкой, для которой обычно используются различные тесты и критерии, то используемый метод полностью противоположен по своей идеологии классическому подходу.

Современный подход к анализу многомерных данных (известный как Big Data в

англоязычной литературе) заключается в следующем: первоначально в имеющихся данных необходимо найти неоднородности, либо иные элементы упорядоченности, а затем исследовать состав выявленных неоднородностей (кластеров) с точки зрения тех показателей, которые характерны для объектов, попавших в кластер. Иными словами, гипотеза «рождается» из самого анализа данных, а не до его проведения. В настоящей работе использовался метод упругих карт для кластеризации данных (выявления неоднородностей) и их визуализации.

Работа метода начинается с определения первых двух главных компонент; это линейный метод понижения размерности, он очень подробно и неоднократно описан, и мы не будем останавливаться здесь на его детальном обсуждении [14]. Отметим только, что геометрически первая главная компонента соответствует тому направлению в пространстве признаков, в котором данные совокупно разбросаны более всего; вторая главная компонента перпендикулярна первой и соответствует второму по значимости направлению разброса данных. На первых двух компонентах строится плоскость, на которую проектируются данные. Затем выбирается минимальный квадрат, который содержит все точки проекций и решётка; от размера решётки зависят эластичные свойства будущей упругой карты. Мы использовали мягкую карту размером 16×16 клеток.

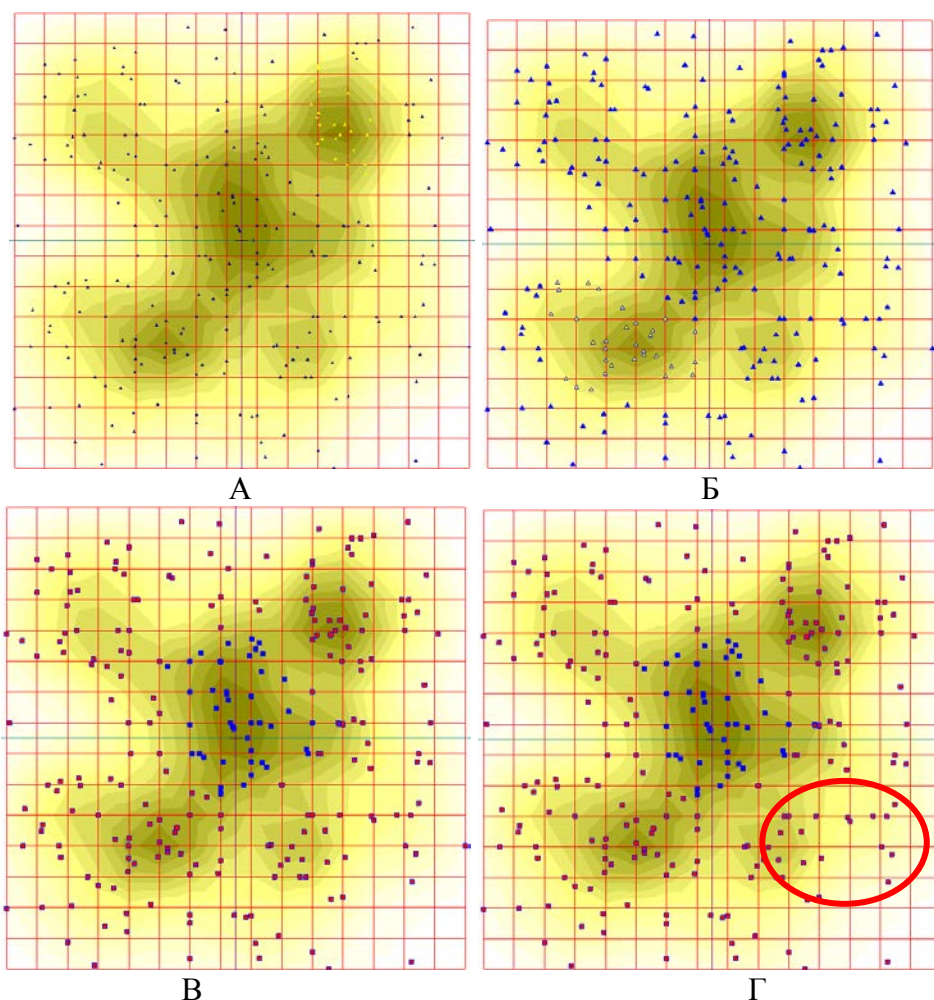


Рисунок 1. Кластеризация больных РЖ методом упругих карт; карты показаны во внутренних координатах. А -- кластер №1 (точки выделены желтым цветом), Б -- кластер №2 (точки выделены белым цветом), В -- кластер №3 (точки выделены синим цветом), Г -- кластер №4 (выделен красным овалом).

Затем каждая точка исходных данных соединяется математической пружиной со своей проекцией; все пружины считаются идеальными и одинаковыми. На следующем шаге первоначально жёсткая плоскость (точнее, выделенный минимальный квадрат) заменяется упругой мембраной, и вся система отпускается, занимая при этом положение, соответствующее минимуму суммарной энергии деформаций: как пружин, так и самой мембраны. После этого положение каждой точки данных переопределяется на деформированной мембране: находится так называемая ортогональная проекция, т.е. такая точка на поверхности деформированной мембраны, которая ближе всего к исходной точке данных. Карта готова для дальнейшего использования. Теперь освободим её от пружин, и она вернётся в исходное плоское состояние; это так называемый переход во внутренние координаты. Образы точек данных при этом также претерпевают определённые превращения.

На полученной карте выделим области повышенной локальной плотности: это такие (сравнительно малые по размеру) участки упругой карты, представленной во внутренних координатах, в которых «концентрация» точек заметно выше, чем в целом по карте. Строгие и точные формулировки могут быть найдены в литературе [15, 16]; мы не будем здесь на них останавливаться, поскольку для нас важнее их содержательный смысл.

Результаты и обсуждение

В результате проведенного статистического анализа методом упругих карт, были выявлены 4 кластера (рис.1).

1 кластер — 25 мужчин в возрасте от 45 до 78 лет. Средний возраст пациентов составил 59,8 лет. 2 кластер – 32 пациента, 31 женщина и 1 мужчина в возрасте от 33 до 77 лет. Средний возраст пациентов составил 59,2 лет. 3 кластер — 46 пациентов, 29 мужчин и 17 женщин в возрасте от 28 до 77 лет. Средний возраст пациентов составил 63,4 года.

4 кластер — 17 женщин в возрасте от 59 до 78 лет. Средний возраст пациентов составил 66,9 лет.

По значениям ИМТ, согласно классификации ВОЗ, осуществлено распределение больных раком желудка в полученных кластерах по категориям ИМТ. Результаты распределения представлены в таблице 1.

Таблица 1

Распределение больных раком желудка в зависимости от ИМТ

Категории ИМТ, кг/м ²	1 кластер		2 кластер		3 кластер				4 кластер	
					мужчины		женщины			
	п	%	п	%	п	%	п	%	п	%
Дефицит массы тела (16,0–18,5)	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Нормальная масса тела (18,5–25,0)	0	0	18	56,3	15	51,7	4	23,5	2	11,8
Избыточная масса тела (25,0-30,0)	19	76,0	13	40,6	14	48,3	7	41,2	5	29,4
Ожирение (30 и более)	6	24,0	1	3,1	0	0	6	35,3	10	58,8

Таким образом, 1-й кластер представлен представителями мужского пола с избыточной массой тела и ожирением, тогда как в 3-м кластере (мужчины) преобладают пациенты с нормальной — 51,7 % и избыточной массой тела — 48,3 %. Среди представительниц женского пола во 2-м кластере преобладают пациентки с нормальной массой тела — 56,3 %, противоположные результаты по распределению пациенток с РЖ представлены в 4-м и 3-м кластерах, преобладают женщины с избыточной массой тела и ожирением. По результатам обследования пациентов с дефицитом массы тела среди 250 пациентов больных РЖ — 11 человек, однако методом упругих карт в представленных четырех кластерах не выявлено ни одного пациента с дефицитом массы тела.

Согласно указанной формуле у больных раком желудка рассчитан индекс полового диморфизма J. M. Tanner. Результаты распределения мужчин и женщин, больных раком желудка, представлены в таблице 2.

Среди обследуемых пациентов, которые составили 4 кластера, выявлено, что среди мужчин, составляющих первый кластер, преобладают пациенты, представители мезоморфного типа телосложения. Среди мужчин в 3-м кластере преобладают пациенты, представители гинекоморфного типа телосложения. Единственный мужчина во 2-м кластере также с инверсией пола. Классический тип телосложения, характерный для мужчин, выявлен в 1-м кластере всего у 2% пациентов и в 3-м кластере у 10,3% больных РЖ. Среди представительниц женского пола во 2-м кластере преобладают пациентки, представительницы гинекоморфного типа телосложения. Аналогичные данные получены при распределении пациенток 4-го кластера по индексу J.M. Tanner (1951). Среди женщин, составляющих 3й кластер, большинство пациенток, представительницы андроморфного типа телосложения, а также промежуточного, мезоморфного типа телосложения.

Таблица 2

Распределение больных раком желудка по индексу полового диморфизма

Тип полового диморфизма	1 кластер		2 кластер		3 кластер				4 кластер	
					мужчины		женщины			
	п	%	п	%	п	%	п	%	п	%
Гинекоморфный тип	6	24,0	18	56,3	20	69,0	2	11,8	6	35,3
Андроморфный тип	2	8,0	1	3,1	3	10,3	7	41,2	2	11,8
Мезоморфный тип	17	68,0	13	40,6	6	20,7	8	47,0	9	52,9

Для более детального изучения физического развития больных раком желудка, с помощью биоимедансометрического анализатора было проведено изучение компонентного состава тела обследуемых пациентов, определение величины фазового угла (табл. 3).

Таблица 3

Сравнительная характеристика биоимпедансометрических показателей у представителей 4-х кластеров обследуемых пациентов, больных раком желудка

Показатели биоимпедансометрии	1 кластер n=25	2 кластер n=32	3 кластер, n=46		4 кластер n=17
			Мужчины n=29	Женщины n=17	
	М	М	М	М	М
Жировая масса, кг	19,876	17,578	13,052	24,318	28,594
Тощая масса, кг	65,22	43,019	56,810	47,882	50,282
Активная клеточная масса, кг	36,344	22,203	31,514	24,771	25,688
Доля активной клеточной массы, %	55,72	50,890	55,755	51,571	50,935
Скелетно-мышечная масса, кг	32,02	19,006	28,453	20,865	21,764
Доля скелетно-мышечной массы, %	49,254	43,7	50,403	43,635	43,735
Основной обмен, ккал / сут.	1763,32	1314,969	1613,488	1393	1426,412
Удельный основной обмен, ккал / м ²	892,052	834,728	910,655	796,094	807,018
Общая жидкость, кг	47,146	13,684	15,851	35,047	36,741
Внеклеточная жидкость, кг	19,66	13,028	18,665	14,947	15,476
Величина фазового угла, градус	6,38	5,53	6,45	5,69	5,56

Наибольшие значения жировой массы, кг выявлены у женщин в 3-м и 4-м кластерах. Наименьшее значение у мужчин в 3-м и 2-м кластерах. Показатели тощей массы, кг и активной клеточной массы, кг, скелетно-мышечной массы, кг, основного обмена, ккал / сут, общей жидкости, кг, внеклеточной жидкости, кг и величина фазового угла, градус имеют наименьшие значения у женщин во втором кластере, тогда как наивысшие значения — у мужчин в 1-м кластере.

Таблица 4

Распределение больных раком желудка по развитию послеоперационных осложнений

Послеоперационные осложнения	1 кластер		2 кластер		3 кластер				4 кластер	
					мужчины		женщины			
	п	%	п	%	п	%	п	%	п	%
Не выявлено осложнений	21	84,0	27	84,4	22	75,9	16	94,1	15	88,2
Интраабдоминальные осложнения	2	8,0	1	3,1	5	17,2	0	0	1	5,9
Экстраабдоминальные осложнения	2	8,0	0	0	2	6,9	1	5,9	1	5,9
Сочетанные осложнения	0	0	4	12,5	0	0	0	0	0	0

Наибольшее количество послеоперационных осложнений выявлено среди мужчин в 3-м кластере и у женщин 2-го кластера. У двух пациентов 1-го кластера развитие послеоперационных осложнений привело к летальному исходу в раннем послеоперационном периоде. У одного из погибших пациентов имело место развитие кровотечения, у другого пациента нарастающая полиорганная недостаточность, которая явилась непосредственной причиной смерти. Среди пациентов с наличием послеоперационных осложнений, составляющих кластеры, всего 2 пациента получали нутритивную поддержку на дооперационном этапе, при этом 1 пациент — мужчина со значительной потерей массы тела до момента установления диагноза и 1 степенью недостаточности питания и один пациент, погибший от явлений полиорганной недостаточности имел 2 степень недостаточности питания до начала нутритивной поддержки.

Выводы

Наименьшие значения показателей биоимпедансометрии и величины фазового угла, коррелирующие с плохим прогнозом и увеличением летальности у онкологических пациентов, выявлены у женщин (2-й кластер), у которых также выявлено наибольшее количество послеоперационных осложнений в послеоперационном периоде. Большинство пациенток данного кластера имели нормальную массу тела и являлись представительницами гинекоморфного типа телосложения. Ни одна из пациенток данного кластера не получала нутритивную поддержку на дооперационном этапе.

Все мужчины в 1-м кластере имели избыточную массу тела, ожирение и являлись представителями мезоморфного и гинекоморфного типов телосложения. При этом у них отмечались наивысшие показатели компонентного состава тела и величины фазового угла. Однако у 4-х пациентов имело место развитие послеоперационных осложнений, 2 пациента с диагностированной нутритивной недостаточностью погибли от тяжелых послеоперационных осложнений.

В результате проведенного исследования выявлена связь между половой принадлежностью, значением ИМТ, морфотипом по ИПД, показателями биоимпедансометрии и развитием послеоперационных осложнений у больных раком желудка.

Список литературы

1. Bray F, Ferlay J, Soerjomataram I. et al. Global Cancer Statistics 2018: GLOBOCAN Estimates of Incidence and Mortality Worldwide for 36 Cancers in 185 Countries. CA: A Cancer Journal for Clinicians 2018;0:1–31.
2. Каприн А. Д., Старинский В. В., Петрова Г. В. Состояние онкологической помощи населению России в 2018 году. М.: МНИОИ им. П. А. Герцена, 2019; 236 с.).
3. Venerito M, Link A, Rokkas T, Malfertheiner P. Review: Gastric cancer: Clinical Aspects. Helicobacter. // 2016. – № 21. – P. 39-44. DOI: 10.1111/hel.12339
4. Cheng XJ, Lin JC, Tu SP. Etiology and Prevention of Gastric Cancer // Gastrointest Tumors. – 2016. – № 3(1). – P.25-36. DOI: 10.1111/hel.12643.
5. Давыдов М.И., Тер-Ованесов М.Д., Абдихакимов А.Н. Рак желудка: что определяет стандарты хирургического лечения // Практическая онкология. – 2001 – №3. – С. 18–24.

6. Kanda M. Preoperative predictors of postoperative complications after gastric cancer resection. // Surg Today. – 2020. – № 50(1). – P. 3-11. doi: 10.1007/s00595-019-01877-8.
7. Хомяков В.М., Хороненко В.Э., Ермошина А.Д. Проблема нутритивной недостаточности и методы ее коррекции у больных со злокачественными опухолями пищевода и желудка // Онкология. Журнал им. П.А. Герцена. – 2016. – №5.– С. 33-37. doi: 10.17116/onkolog 20165533-37
8. Снеговой А. В., Бесова Н. С., Веселов А. В., Кравцов С. А., Ларионова В. Б., Сельчук В. Ю. и соавт. Практические рекомендации по нутритивной поддержке у онкологических больных // Злокачественные опухоли. – 2016. – № 4. Спецвыпуск 2. – С. 434–450
9. Tweed T, van Eijden Y, Tegels J, Brenkman H, Ruurda J, van Hillegersberg R, Sosef M, Stoot J. Safety and efficacy of early oral feeding for enhanced recovery following gastrectomy for gastric cancer: A systematic review // Surgical Oncology. – 2019. – №28.– С. 88-95. doi: 10.1016/j.suronc.2018.11.017.
10. Медведева Н. Н., Николаев В. Г., Деревцова С. Н. Оценка соматонейропсихологического здоровья человека. // Сибирское медицинское обозрение. – 2016. – № 3. – С. 73–80.
11. Ларионова В.Б., Кононенко И.Б., Мюллер У., Матвеев Н.В., Королева И.А. Поддерживающая терапия в онкологии. Решение нерешенной проблемы. XX Российский онкологический конгресс. Сателлитный симпозиум компании Teva «Эффективная фармакотерапия. Онкология, гематология и радиология» № 3 (37) /53. 2016
12. Li YF, Nie RC, Wu T, Li SM, Chen S, Wang W, Chen XJ, Chen GM, Chen YB, Zhou ZW, Yuan SQ. Prognostic Value of the Nutritional Risk Screening 2002 Scale in Metastatic Gastric Cancer: A Large-Scale Cohort Study //J Cancer. –2019. –№ 1;10(1). – P. 112-119. doi: 10.7150/jca.27729.
13. Tanner JM. Current advances in the study of physique: photogrammetric anthropometry and an androgyny scale. // The Lancet. – 1951. – № 1 (6654). – P. 574–9.
14. Фукунага К. Введение в статистическую теорию распознавания образов. М.: Мир, 1979. 576 с.
15. A.N. Gorban, B. Kegl, D. Wunsch, A. Zinovyev (Eds.), Principal Manifolds for Data Visualisation and Dimension Reduction, LNCSE 58, Springer: Berlin – Heidelberg – New York, 2007.
16. A. N. Gorban, A. Y. Zinovyev, Principal Graphs and Manifolds, In: Handbook of Research on Machine Learning Applications and Trends: Algorithms, Methods and Techniques, Olivas E.S. et al. Eds. Information Science Reference, IGI Global: Hershey, PA, USA, 2009. 28–59.

МОДЕЛИРОВАНИЕ УСЛОВИЙ СВЯЗИ ДЛЯ СЕТЕЙ ПЕРЕДАЧИ ДАННЫХ КВ-ДИАПАЗОНА

А.Ю. Дорогов

ПАО «Информационные телекоммуникационные технологии» («Интелтех»),
vaksa2006@yandex.ru

Введение.

Для КВ-диапазона определяющим фактором распространения радиоволн является наличие околосредней ионосферы. Следующие физические явления ионосферы оказывают существенное влияние на построение протоколов передачи данных КВ-радиосетей [1]:

- нестационарная помеховая обстановка, вызванная работой изменяющимися условиями распространения радиоволн и сторонних систем радиосвязи;
- неселективные замирания длительностью 4...20 секунд;
- многолучевое распространение сигнала с временем многолучёвости до 5...6 мс, и доплеровским размытием между лучами до 2 Герц;
- сосредоточенные помехи в канале с уровнем до + 60 Дб от уровня сигнала.

Сложность и постоянная изменчивость структуры ионосферы, наличие множества факторов, оказывающих влияние на распространения радиоволн в такой среде, сложная топология сетей связи приводят к необходимости компьютерного моделирования передачи данных в сетях КВ-диапазона.

Международным Союзом Электросвязи (ITU) разработана математическая модель для прогнозирования рабочих характеристик ВЧ-линий. Модель оформлена в виде рекомендации МСЭ-R P.533-13 (07/2015) [2] и программных средств на языке Fortran [3] для ОС Windows. Модель позволяет производить расчёт характеристик КВ-радиолиний с дистанцией до 9000 км (в режиме «Точка-точка») и радиозон покрытия (в режиме «Зона»). Программные средства доступны в виде исполняемых программ моделирующего комплекса и исходных кодов отдельных подпрограмм. В состав комплекса входит база данных антенн и редактор для изменения их характеристик.

Следует отметить, что исходные коды написаны на языке Fortran старой версии и поэтому требуют адаптации к современным компиляторам. В составе исходных кодов отсутствует пользовательский интерфейс для моделирующего комплекса в целом. Исходные коды представляют собой набор подпрограмм и статических библиотек из программных модулей. Программный интерфейс к модулям не стандартизован. Указанные обстоятельства потребовали модификации исходного программного обеспечения и разработки собственного программного и пользовательского интерфейса для моделирующего комплекса. В новом варианте программный и пользовательский интерфейсы были реализованы средствами программной среды Матлаб. Разработанный моделирующий комплекс использует структуру директориев исходного комплекса и полностью совместим с ним по форматам хранения данных.

Программная модель «точка-точка»

Программная модель предназначена для прогнозирования характеристик радиолинии между приёмником и передатчиком. Для сетевой поддержки реализован режим расчёта характеристик для набора радиолиний. Исходными данными программы являются: координаты размещения приёмника и передатчика, характеристики

приёмной и передающей антенны, мощность передатчика; время (1-24 час), месяц (1-12), год, расчётные частоты (до 10), солнечная активность.

Расчёт характеристик выполняется по всем частотам, по всем месяцам для каждого часа суток. Объем расчётов можно ограничить, конкретно указав желаемые частоты, часы и месяцы. Солнечная активность определяется числом солнечных пятен и устанавливается по номеру года из хранимого файла данных.

Радиоволны в КВ-диапазоне распространяются за счет отражения от ионизированных слоев ионосферы. Закон секанса устанавливает связь между частотами радиоволн, отражающихся от ионосферы при вертикально направленном излучении f_e , и частотами радиоволн, отражающихся от той же области ионизации в случае наклонного излучения. Закон описывается выражением:

$$f_{\text{накл}} = f_e \sec \varphi_0.$$

где φ_0 - это угол между нормалью к ионосферному слою и направлением падающего на него луча (см. рис. 1).

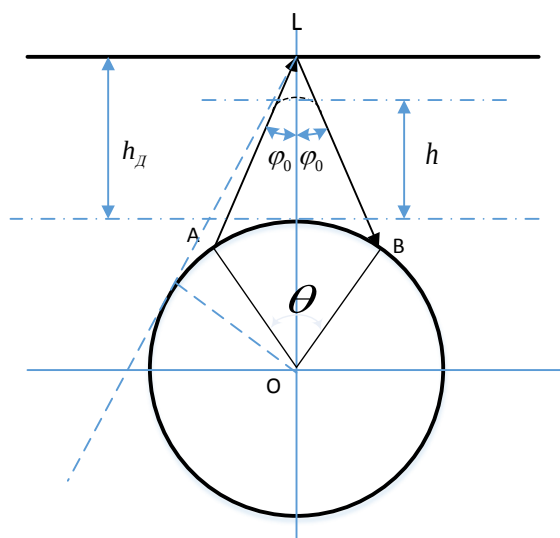


Рис. 1. Схема отражения радиоволны от ионизированного слоя

Отражающими слоями ионосферы могут быть F1, F2 и E. Слои находятся на разной высоте, наличие слоев в ионосфере зависит от времени суток и солнечной активности. Отражение возможно от всех слоев, слой, который обеспечивает максимальный сигнал в точке приёма называется модой. На рис. 1 показана односкачковая трасса распространения, дальность односкачковой связи ограничена геометрией Земли (точка С – на рисунке). Предельное значение угла отражения определяется выражением:

$$\sin \varphi_0 = \frac{R}{R + h_D},$$

где R = средний радиус Земли ($R = 6371.0$ км), h_D - действующая высота отражающего слоя, h - фактическая высота слоя, Ограничение угла φ_0 ведёт к ограничению возможного расстояния односкачковых трасс (2000÷4000 км). На рис. 2 показаны моды распространения по расчетным частотам на июнь 2018г. для трассы Улан-Уде – Екатеринбург (расстояние 3036 км).

Возможны также многоскачковые трассы, позволяющие радиоволне обогнуть земной шар. В программе есть возможность выбора расчёта для «короткого» или «длинного» пути. На рис. 3 для этой же трассы показаны количество скачков для расчетных мод.

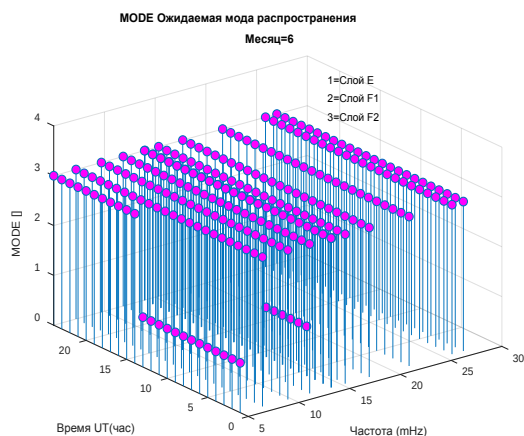


Рис.2. Ожидаемые моды распространения по расчетным частотам

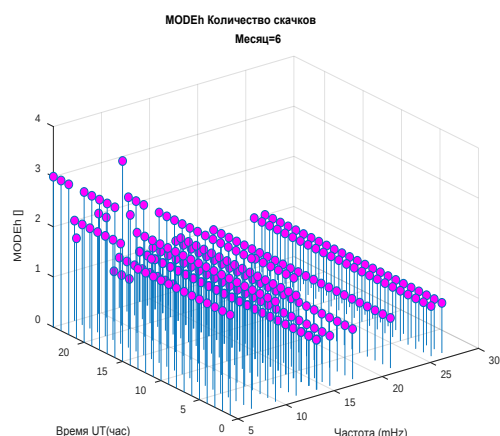


Рис.3. Количество скачков для расчетных мод

Программа вычисляет азимуты направления антенн и углы возвышения антенн для расчетных частот. В соответствии с рекомендацией МСЭ-R P.533-13 программа позволяет вычислить медианные оценки следующих характеристик:

- 'DBU' - $\text{dB}(1\mu\text{V/m})$ - медиана напряженности поля ожидаемая в месте приема взятая по выборке для всех дней месяца (в децибелах относительно микровольта на метр)
- dBpW - (dBpW) Медиана мощности сигнала взятая по выборке для всех дней месяца ожидаемая в месте приема (в децибелах относительно пиковатта).
- 'S/N' - (dB) - месячная медиана отношения сигнал/шум (S/N) для ожидаемой моды в полосе частот BandWidth (см. rec533-13 п.7).
- 'FS/N' - расчетная надежность. Диапазон $[0 - 0.99]$. Вероятность того, что отношение сигнал/шум (SNR) превысит требуемое значение (Req. SNR).
- 'SNxx' - (dB) - отношение сигнал/шум для требуемой надежности.

На рис 4. показана медиана мощности сигнала в точке приема. На рис. 5 показано отношение сигнал/шум для той же радиолинии. В процессе расчета строятся графики для максимальной, минимальной и оптимальной применимых частот (см. рис. 6).

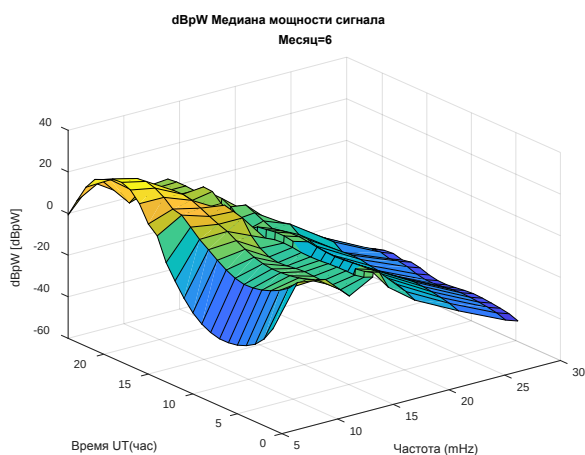


Рис. 4. Мощность сигнала в точке приема по расчетным частотам

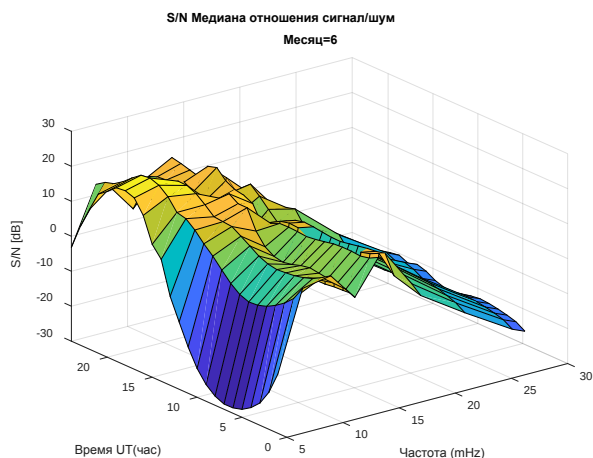


Рис.5. Отношение сигнал/шум

На этапе проектирования радиолинии задаются системные параметры, которые учитываются при расчетах, к ним относятся:

- Req. Rel. (%) – требуемая надежность радиолинии, оценивается процентом дней в течении месяца когда сигнал имеет допустимое качество. Диапазон значений $[1 \div 99]\%$, по умолчанию 90%;
- Req. SNR – (dB) требуемое отношение медианы почасовой выборки сигнальной мощности к медиане почасовой выборки шума в полосе 1 Гц, которую необходимо обеспечить для требуемого типа и качества обслуживания. Диапазон значений $[-30 - 99 \text{ dB}]$, по умолчанию 73 Db;
- Noise (dBW) – определяет уровень техногенного шума в приемнике в dBW (децибел на Ватт) в полосе 1 Гц на частоте 3 МГц, значение по умолчанию - 145 Dbw;
- BandWidth (Гц) – полоса приема. Расчетная ширина полосы шума на приемнике.

Для цифровой модуляции дополнительно задаются частотное и временное окно кодовых посылок.

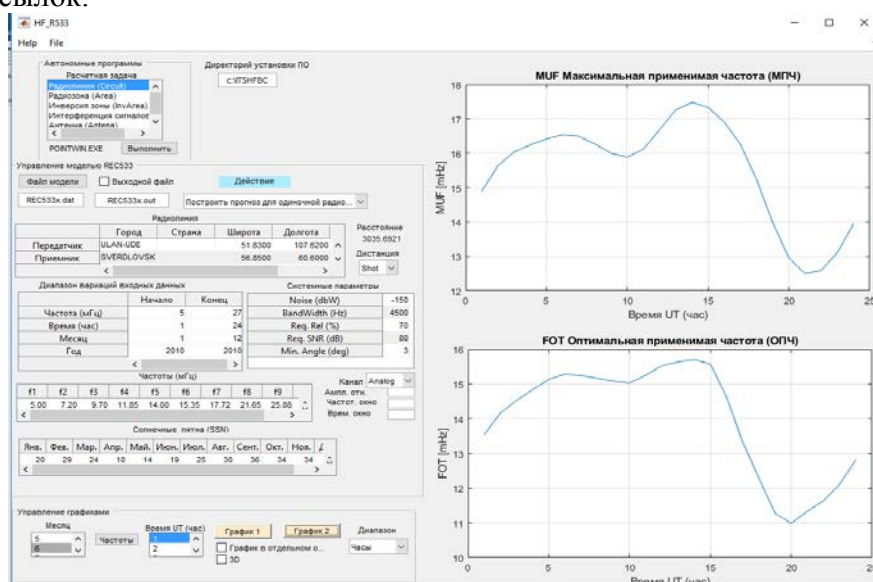


Рис.6. Пользовательский интерфейс программы

На рис. 6 показан пользовательский интерфейс программы. В поле управления размещены два окна графического отображения. Любое число графиков можно отобразить в дополнительных окнах. Результаты расчетов могут быть сохранены в виде таблицы в формате csv.

Программная модель «Зона»

Программная модель предназначена для прогнозирования распространения сигнала в радиозоне. Зона задается относительно выбранного центра зоны в градусах или в километрах по направлениям «на Восток», «на Запад», «на Север», «на Юг». Отдельно указывает место размещения передатчика, мощность передатчика и характеристики передающей антенны. Зона покрывается равномерной сеткой в узлах которой находятся приемники. Минимальный размер сетки 5×5 , максимальный 999×999 . Все приемники имеют совпадающие характеристики антенн. Расчет производится для $1 \div 9$ возможных вариантов. Варианты отличаются по частоте, номеру

месяца, часу суток и солнечной активности. Солнечная активность определяется числом солнечных пятен и устанавливается по номеру года.

На рис. 7 показан 3D график изменения отношения сигнал/шум в зоне размером 1000×1000 км., центром которой является Москва.

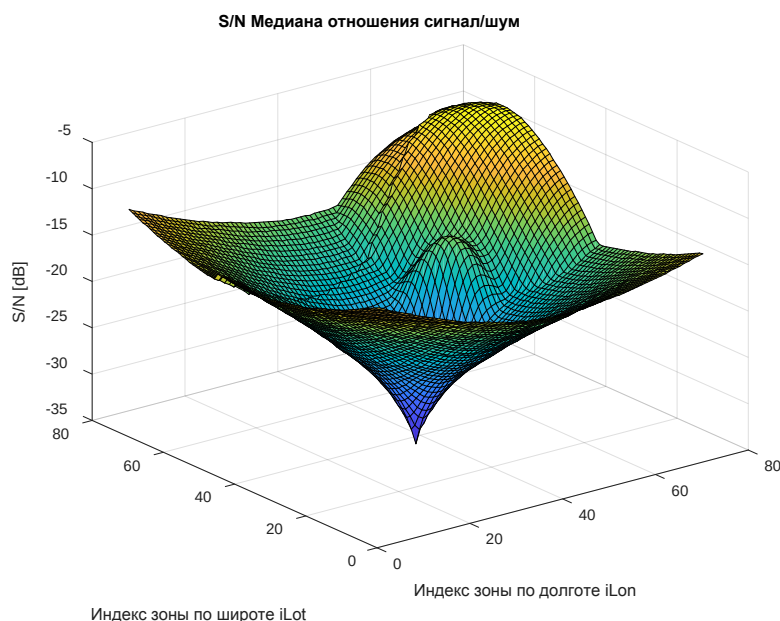


Рис.7. Функция изменения сигнал/шум в радиозоны 3D представлении

Программа позволяет вычислить в зоне медианные оценки следующих характеристик:

- Ожидаемую моду распространения для каждого узла сетки зоны;
- Угол возвышения приемной антенны в узлах зоны;
- 'DBU' dB(1uV/m)) - медиана напряженности поля ожидаемая в узлах приема для всех вариантов (в децибелах относительно микровольта на метр);
- 'S/N' (dB) - месячная медиана отношения сигнал/шум (S/N) в узлах сетки для ожидаемой моды в полосе частот BandWidth для всех расчетных вариантов;
- 'FS/N' - расчетная надежность радиолиний в узлах сетки. Диапазон $[0 \div 0.99]$. Вероятность того, что отношение сигнал/шум (SNR) превысит требуемое значение (Req. SNR) для всех расчетных вариантов;
- 'SNxx' (dB) - отношение сигнал/шум в узлах сетки для требуемой надежности для всех расчетных вариантов.

Передатчик размещен в центре зоны. Зона покрыта сеткой размером 71×71 . При отображении характеристик зоны в плоскости 2D используется цветовая палитра. В плоскости графика можно интерактивно выбрать точку с желаемой интенсивностью, которая отображается маркером, и сохраняется по географическим координатам и уровню в таблице маркеров.

Радиозона может быть отображена на географической карте в цветовой палитре. Интерактивный маркер позволяет определить координаты желаемой точки (рис. 9). При расчете радиозоны используются системные параметры, которые задаются также как для программы «Точка-точка».

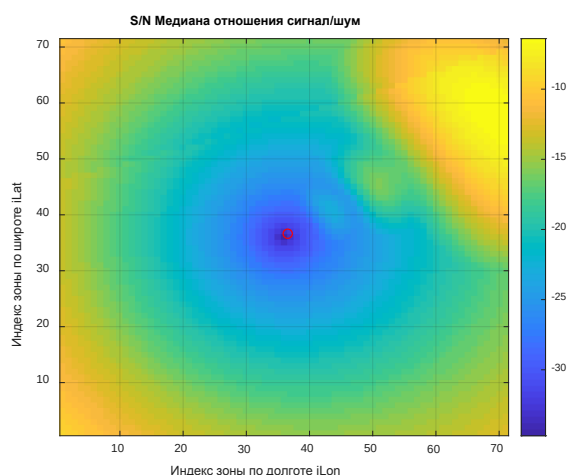


Рис.8. Функция изменения сигнал/шум в 2D представлении

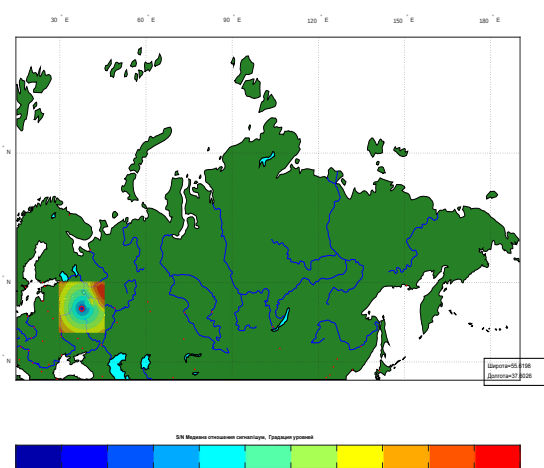


Рис.9. Отображение радиозоны на географической карте

Заключение

Моделирующий комплекс обеспечивает проектировщиков расчетным характеристиками достаточными для оценки характеристик радиоканалов сетей КВ-диапазона. В расширенном варианте комплекс содержит возможность выбора типа цифровой модуляции и расчета битовых ошибок передаваемых сообщений, построение волнового расписания для радиолиний сети, моделирование протоколов передачи данных [4,5].

Список литературы

1. Побережский Е.С. Характеристики типичных коротковолновых трасс / Техника средств связи. Серия Техника радиосвязи. 1978г. Выпуск 9. – стр. 88-92.
2. Рекомендация МСЭ-R P.533-13 (07/2015) Метод для прогнозирования рабочих характеристик ВЧ-линий. Серия Р. Распространение радиоволн.
3. Institute for Telecommunication Sciences / Resources / Radio Propagation Software / High Frequency / REC533 Propagation Model, <https://www.its.blrdoc.gov/resources>
4. Дорогов А.Ю. Программная модель формирования волнового расписания КВ-радиолиний КВ-сети / В настоящем сборнике.
5. Дорогов А.Ю., Потапов И.А., Тутене А.С. Моделирование протоколов беспроводных сетей в среде Матлаб / "H&ES Research – Научные технологии в космических исследованиях Земли" № 3, 2019, С. 32-45. URL: <http://www.h-es.ru/images/archive/Nom-3-2019.pdf>

ПРОГРАММНАЯ МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ ВОЛНОВОГО РАСПИСАНИЯ РАДИОЛИНИЙ КВ-СЕТИ

А.Ю. Дорогов

ПАО «Информационные телекоммуникационные технологии» («Интелтех»),
vaksa2006@yandex.ru

Введение

Ионосферная радиосвязь в КВ диапазоне (3÷30 МГц) является экономически эффективной средой для многих видов телекоммуникационных услуг, требующих передачи данных за пределы прямой видимости. Для Российской Федерации высоконадёжная сеть КВ-диапазона масштаба страны представляется недорогой альтернативой спутниковым системам связи при предоставлении телекоммуникационных услуг службам МЧС, РЖД, силовым ведомствам, а также региональным администрациям и многочисленным хозяйственно-экономическим структурам.

Для КВ-диапазона определяющим фактором распространения радиоволн является наличие околосредней ионосферы. Структура и свойства ионосферы существенно изменяются с высотой. Процессы, протекающие в ионосфере, тесно связаны с волновым и корпускулярным излучением Солнца, с процессами в магнитосфере, вариациями магнитного поля Земли, с движением верхней атмосферы и т.д. [1]. Этим обусловлена сильная изменчивость свойств ионосферы от времени суток, времени года, циклов солнечной активности, а также в зависимости от высоты и наличия отражающего слоя, географической широты и долготы приёмника и передатчика.

Сложность и постоянная изменчивость структуры ионосферы, наличие множества факторов, оказывающих влияние на распространения радиоволн в такой среде, а также сложная топология сетей связи приводят к необходимости компьютерного моделирования передачи данных в сетях КВ-диапазона.

Программная модель службы ИВ-ЧДС

При работе в сетевом окружении необходимой составляющей организации системы связи является Ионосферно-Волновая Частотно-Диспетчерская служба (ИВ-ЧДС). Служба предназначена для построения волнового расписания всех радиолний радиосети КВ-диапазона по данным радио прогноза условий связи. Программная модель ИВ-ЧДС является составной частью моделирующего комплекса для радиосетей КВ-диапазона [2]. Исходными данными для модели является рабочие частоты, суточный прогноз условий связи и допустимая вероятность ошибки для обеспечения заданного качества связи. Модель позволяет выполнить построение двух типов волнового расписания: многочастотного и двухчастотного.

Многочастотное расписание – изменение рабочей частоты происходит каждый час. Частота выбирается из списка рабочих частот, передача данных на которых не превышает допустимый уровень ошибки. Выбор осуществляется по минимальному значению ошибки пакета. В случае равенства ошибок выбирается наибольшая частота. Если для всех рабочих частот текущего часа уровень ошибки меньше порогового, то значение частоты принимается равным нулю (это является индикатором нарушения допустимых условий связи), а уровень ошибки устанавливается к минимальному по всем частотам значению ошибки пакета.

Двухчастотное расписание – используются две рабочих частоты: дневная и ночная. Смена частот происходит на границе между днём и ночью. На временных

интервалах дня и ночи выбирается частота, на которой уровень ошибки не превышает допустимый. Приоритет имеют частоты с наибольшим числом часов работы при допустимой ошибке. При равенстве приоритетов выбирается частота, имеющая наибольшее значение. Если для выбранной частоты на некотором часовом интервале уровень ошибки превышает допустимый, то для этого интервала значение частоты принимается равным нулю, а уровень ошибки устанавливается по фактическому значению для данного часа. На рис. 1 показано волновое двухчастотное расписание для трассы Хабаровск-Екатеринбург на октябрь 2018 г.

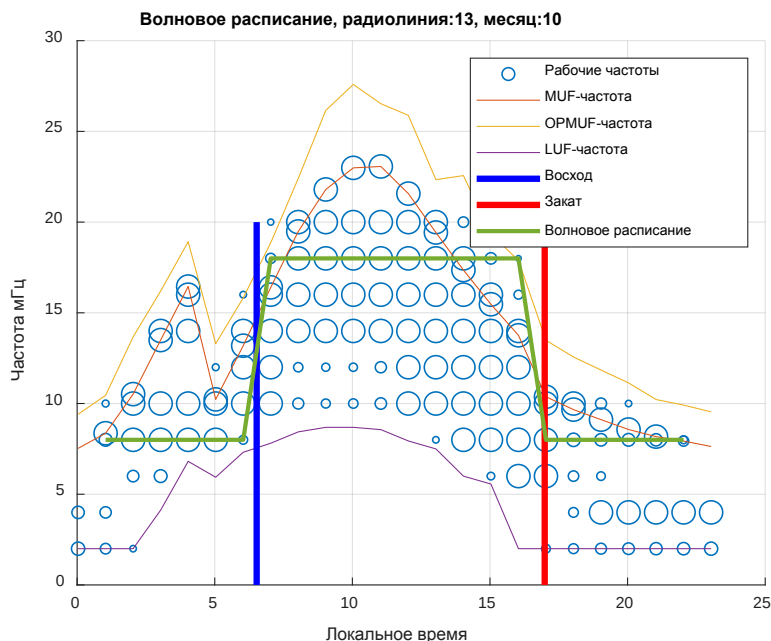


Рис. 1. Двухчастотное волновое расписание для трассы Хабаровск-Екатеринбург

Размер маркеров на графике показывает качество канала на рабочих частотах. Чем больше размер маркера, тем выше качества канала (тем меньше уровень ошибки пакета на приёмной стороне радиолинии). На рис. 2 показано многочастотное волновое расписание для той же трассы.

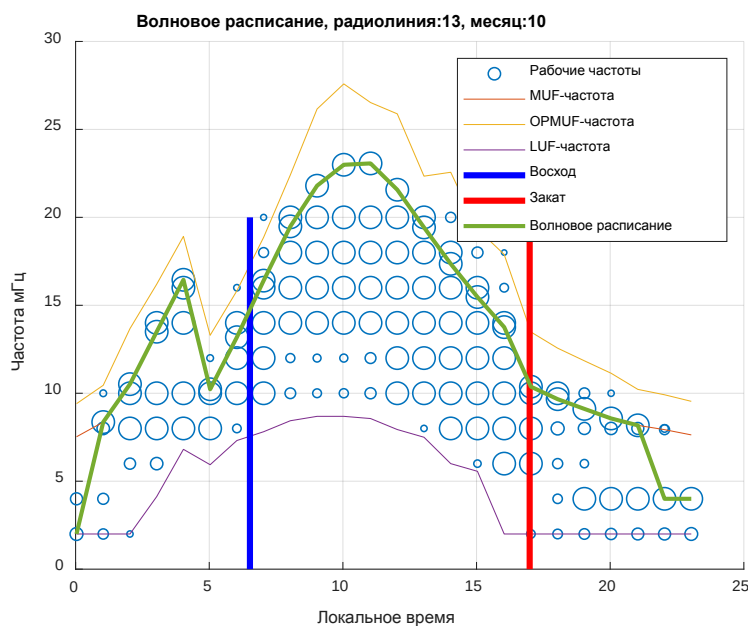


Рис. 2. Многочастотное волновое расписание для трассы Хабаровск-Екатеринбург

На рисунке также показаны временные позиции восхода и заката Солнца и расчетные критические частоты: MUF – максимальная применимая частота, LUF – минимально-применимая частота, OPMUF – операционная частота MUF. Описание и назначение критических частот приведено в рекомендации МСЭ-R P.533-13 Международного Союза Электросвязи (ITU) [3].

Модель позволяет также оценить суточную связанность для радиолинии сети по пороговому уровню ошибки на пакет. На рис. 3 показана диаграмма суточной связанности сети, состоящий из 14 радиолиний, для 7 месяца 2018г. при пороговом уровне вероятности пакетной ошибки 0.001.



Рис. 3. Диаграмма суточной связанности радиолиний сети

По горизонтальной оси отложено универсальное время, отсчитываемое на долготе Гринвичского меридиана. В пустых позициях диаграммы «зонах молчания» уровень пакетных ошибок выше допустимого, что можно считать отсутствием связи требуемого качества. Точки на диаграмме соответствуют достаточному уровню достоверности данных на приёмной стороне.

На рис. 4 показано многочастотное волновое расписание для линии Хабаровск-Екатеринбург (13 радиолиния) на 7 месяц 2018г с нарушениями качества связи. Сдвиг «зоны молчания» на последнем рисунке по отношению к «зоне молчания» 13 радиолинии на рис. 3 обусловлен сдвигом на 4.2 часа локального времени места размещения приёмника по отношению к универсальному времени.

Интерфейс модели позволяет установить календарную дату, выбрать границу сумерек, установить размер пакета, установить пороговое значение ошибки на пакет, показать географические координаты преемника и передатчика, время восхода, заката и часовой пояс, загрузить таблицу радиолиний сети и таблицу битовых ошибок. Построенное волновое расписание можно сохранить в текстовом файле в виде таблицы.

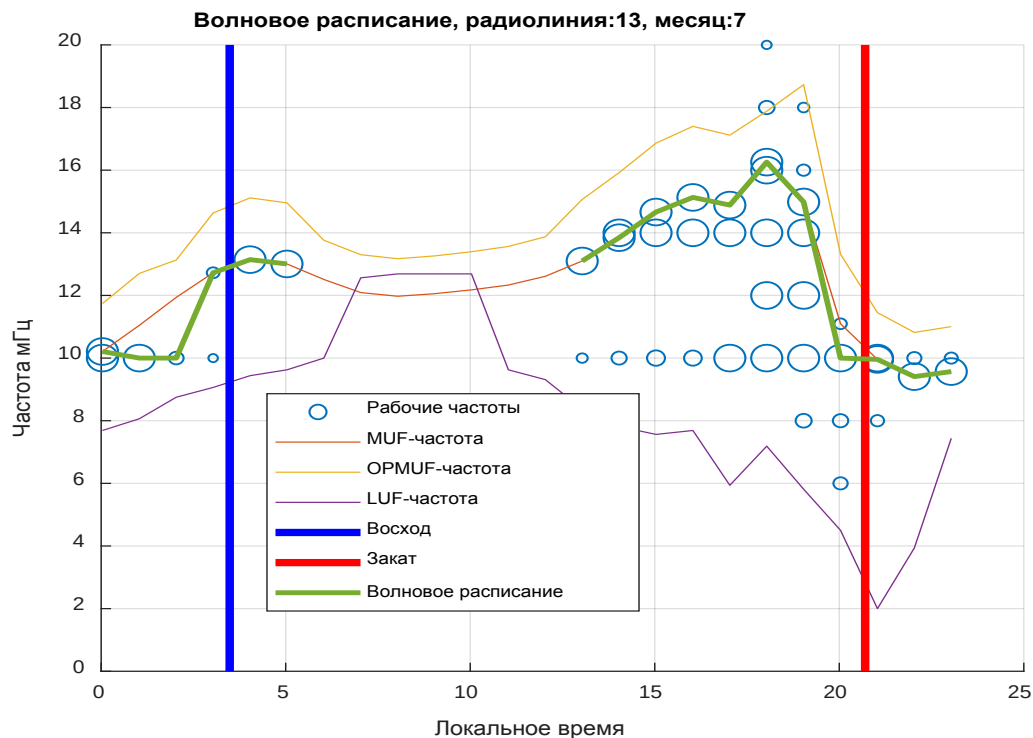


Рис. 4. Многочастотное волновое расписание Хабаровск-Екатеринбург на 7 месяц 2018г.

Схема моделирования процесса работы пакетной радиосети

Схема моделирования процесса работы пакетной сети показана на рис. 5. Цель моделирования заключается в оценке основных вероятностно-временных характеристик КВ-радиосети по передаче сообщений и эффективности выбранных протоколов взаимодействия при работе радиополос в пакетном режиме в условиях изменяющихся условий связи. Взаимодействие моделей осуществляется через общую память или файловую систему.

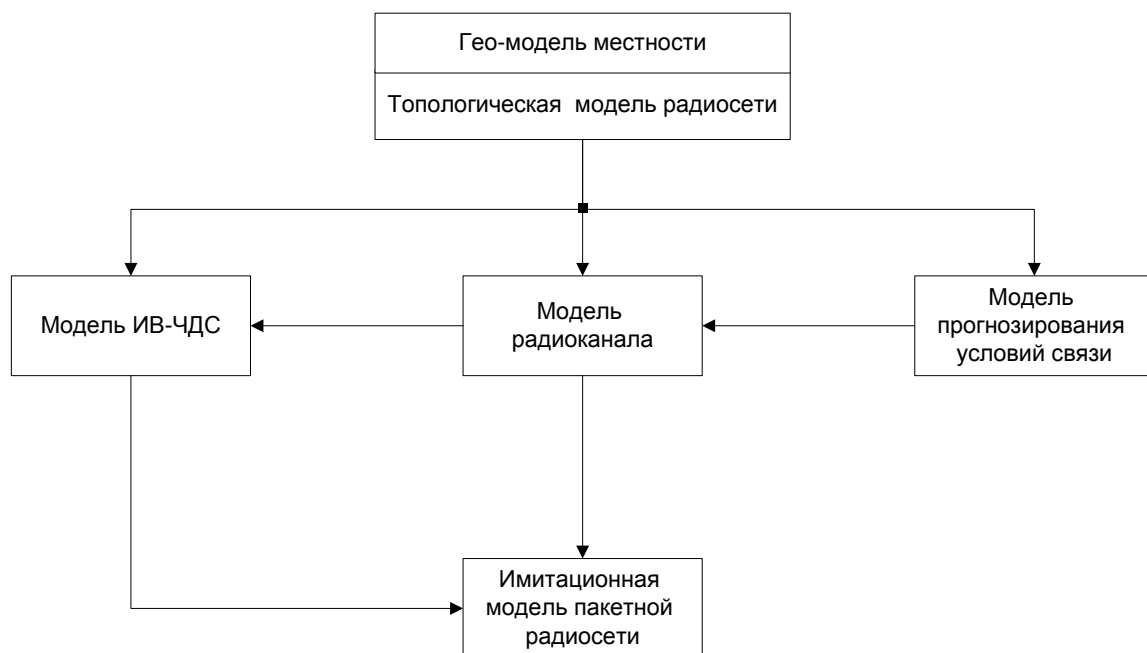


Рис. 5. Схема моделирования процесса работы радиосети

Исходные данные по району размещения сети представлены в гео-модели местности. На гео-модель наложена топологическая модель радиосети, определяющая связи между сетевыми узлами. Модель Прогнозирования условий связи [4] производит почасовой расчёт прогноза отношения сигнал/шум по рабочим частотам (а также максимально-применимой частоте MUF) для всех радиолиний сети на период от 1 до 12 месяцев года. Модель радиоканала использует эти данные для расчёта битовых ошибок и ошибок на пакет по радиолиниям сети во временном пространстве час-месяц. Программная модель ИВ-ЧДС использует таблицу битовых ошибок для расчёта волнового расписания по радиолиниям. Волновое расписание работы радиолиний, топология сети и гео-данные района размещения сети загружаются в имитационную модель пакетной радиосети. Эта модель выполняет имитационное моделирование протоколов передачи данных в расчётном временном интервале с модельной длительностью до одного года. По выбранной нагрузке на сеть устанавливаются интенсивность генерации пакетов данных на узлах сети. Результатом моделирования являются вероятностно-временные характеристики (VBX) работы сети на расчётном временном интервале. В состав VBX включаются характеристики надёжности, достоверности и своевременности доставки пакетов и сообщений через сеть.

Заключение

Имитационное моделирование является базовым средством разработки телекоммуникационных сетей, позволяющим оценить характеристики и выбрать настроечные параметры протоколов передачи данных для КВ-сетей. Для задач проектирования радиосети необходимо иметь оценки VBX при изменяющихся условиях связи за достаточно длительный временной интервал. Для КВ-диапазона это особенно актуально, поскольку период стационарности ионосферы редко превышает 20 мин. Представленная модель ИВ-ЧДС является составной частью моделирующего комплекса решающего эту задачу.

Результаты моделирования дают возможность рациональным образом выбрать параметрическую область проектных решений, удовлетворяющую нормативным требованиям.

Список литературы

1. ИЗМИРАН – институт земного магнетизма / Ионосфера и распространение радиоволн. [Электронный ресурс] URL: <http://www.izmiran.rssi.ru/>.
2. Дорогов А.Ю., Потапов И.А., Тутене А.С. Моделирование протоколов беспроводных сетей в среде Матлаб / "H&ES Research – Научные технологии в космических исследованиях Земли" № 3, 2019, С. 32-45. URL: <http://www.h-es.ru/images/archive/Nom-3-2019.pdf>.
3. РЕКОМЕНДАЦИЯ МСЭ-R P.533-13 (07/2015) Метод для прогнозирования рабочих характеристик ВЧ-линий. Серия Р. Распространение радиоволн. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.itu.int/pub/R-REC/ru..>
4. Дорогов А.Ю. Моделирование условий связи для сетей передачи данных КВ-диапазона / В настоящем сборнике.

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ВОЗДЕЙСТВИЯ ИМПУЛЬСНОГО СЕЙСМОИСТОЧНИКА НА ГРУНТ С УЧЁТОМ ДИССИПАТИВНЫХ СВОЙСТВ ПРИМЕНЯЕМЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ¹

Е.А.Ефимов

Институт вычислительного моделирования СО РАН, eugene6467@mail.ru

Данная работа посвящена математическому моделированию волновых процессов, протекающих в грунте под воздействием импульсного сейсмоисточника. Разработана вычислительная технология, основанная на математической модели динамики вязкоупругих, упругопластических и пористых геологических сред [1]. Используемый комплекс программ позволяет с высокой степенью детализации моделировать волновые поля в блочно-слоистых геологических средах с разными механическими характеристиками слоёв [2, 3].

При численной реализации была использована конечно-разностная схема, основанная на методе распада разрыва Годунова. Схема обеспечивает монотонность решения и сохраняет фронт волны разрывных решений. Благодаря этим свойствам, можно получить чёткие картины возбуждаемых в среде волновых полей. Однако за счёт наличия искусственной (схемной) диссипации довольно трудно точно рассчитать энергетические потоки и связанный с ними сейсмический КПД. Особенно заметно влияние искусственной диссипации при решении осесимметричных задач, поскольку аппроксимация недивергентных слагаемых вносит существенный вклад в общую диссипацию энергии.

Одним из способов борьбы со схемной диссипацией может быть применение разностных схем Иванова с контролируемым параметром диссипации для осесимметричных задач линейной теории упругости. Разностные схемы такого типа, применённые для моделирования продольных цилиндрических волн, показали хорошие результаты: полученные численные решения сохраняют монотонность и имеют малую погрешность в сравнении с аналитическим решением [4]. Однако внедрение таких схем в существующий параллельный алгоритм требует основательной его переработки.

В данной работе на примере осесимметричной задачи линейной теории упругости проведена оценка влияния искусственной диссипации энергии и предложен способ для уточнения энергетических характеристик, позволяющих более достоверно оценить сейсмический КПД.

Предполагая, что грунт представляет собой чисто упругую однородную изотропную плоскостную среду с однородными и изотропными слоями, можно перейти к рассмотрению осесимметричной задачи динамической теории упругости. Пусть x_1 – ось симметрии, направленная вглубь грунтового массива, а x_2 – радиальная ось, направленная горизонтально. Запишем систему уравнений:

$$\begin{aligned} \rho x_2 v_{1,t} &= (\sigma_{11} x_2)_{,1} + (\sigma_{12} x_2)_{,2}, & \rho x_2 v_{2,t} &= (\sigma_{12} x_2)_{,1} + (\sigma_{22} x_2)_{,2} - \sigma_{33}, \\ \frac{1}{E} \sigma_{11,t} - \frac{\nu}{E} (\sigma_{22} + \sigma_{33})_{,t} &= v_{1,1}, & \frac{1}{E} \sigma_{22,t} - \frac{\nu}{E} (\sigma_{33} + \sigma_{11})_{,t} &= v_{2,2}, \\ \frac{1}{E} \sigma_{33,t} - \frac{\nu}{E} (\sigma_{11} + \sigma_{22})_{,t} &= \frac{v_2}{x_2}, & \frac{1}{\mu} \sigma_{12,t} &= v_{1,2} + v_{2,1}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $E = 2\mu(1+\nu)$ – модуль Юнга, μ и ν – модуль сдвига и коэффициент Пуассона.

¹ Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2020-1631).

Решение задачи будем искать в цилиндрической области Ω глубиной L_1 и радиусом L_2 . Условия на поверхности грунта такие, что $\sigma_{11}(t, 0, x_2) = p(t)$ при $x_2 \leq r_0$ и $\sigma_{11}(t, 0, x_2) = 0$ при $x_2 \geq r_0$, где r_0 – радиус плиты сейсмоисточника, а $p(t)$ – функция давления. На оси симметрии ставятся условия: $v_2 = 0$, $\sigma_{12} = 0$.

В основе численного алгоритма лежит метод двуциклического покомпонентного расщепления по пространственным переменным. В случае двумерной осесимметричной задачи на временном интервале $(t_0, t_0 + \Delta t)$ метод расщепления состоит из шести этапов. Первый этап – решение одномерной задачи в направлении x_1 на интервале $(t_0, t_0 + \Delta t/2)$, в направлении x_2 второй этап аналогичен, а третий этап состоит в решении системы обыкновенных дифференциальных уравнений, возникающей за счёт наличия недивергентных слагаемых. Повторный пересчёт задачи на интервале $(t_0 + \Delta t/2, t_0 + \Delta t)$ проходит в следующей последовательности: решается система в направлении x_2 , затем система ОДУ и далее этап пересчёта в направлении x_1 . Такой метод имеет второй порядок точности, если на этапах расщепления используются схемы второго порядка [5].

На этапах расщепления в направлении x_1 и x_2 применяется схема типа предиктор–корректор, за основу которой берется метод распада разрыва С.К. Годунова. Используется процедура ENO (Essentially Non Oscillatory) реконструкции, которая кусочно-постоянное распределение скоростей и напряжений перестраивает в кусочно-линейное распределение с минимальными разрывами на границах ячеек сетки. Благодаря этому можно достичь второго порядка точности в областях монотонного изменения решения. Для решения системы ОДУ применяется неявная разностная схема Кранка–Николсон, имеющая второй порядок точности.

Численный эксперимент проводился при воздействии импульсной нагрузки. На рис.1 изображена зависимость давления от времени. График изменения давления, создаваемого сейсмоисточником, имеет участок монотонного, почти линейного, нарастания и участок с постоянным давлением. Затем происходит резкая, практически мгновенная разгрузка.

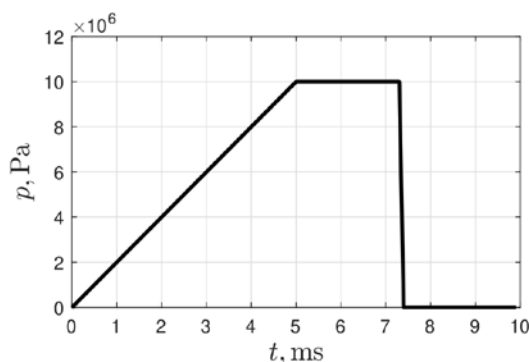


Рис.1. График зависимости давления от времени.

Чтобы оценить влияние схемной диссипации, рассмотрим некоторую область $V \subset \Omega$, изображённую на рис.2. Посчитаем задачу для достаточно большого времени T , при котором волны успевают пересечь границы этой области. Закон сохранения энергии для области V выпишем в следующем виде:

$$D_V = W_0 - (W_R + W_H + W_V). \quad (2)$$

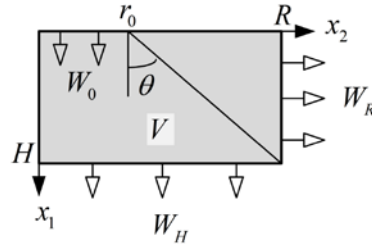


Рис.2. Область расчёта энергетических зависимостей.

где D_V – схемная диссипация энергии. Потоки энергии через часть верхней поверхности радиусом r_0 , через нижнюю поверхность на глубине H , через боковую цилиндрическую поверхность радиусом R и энергия, накапливаемая внутри рассматриваемой области V , вычисляются по формулам:

$$W_0 = \pi \int_0^T p(t) \left(\int_0^{r_0} v_1(0, x_2, t) dx_2^2 \right) dt, \quad W_H = \pi \int_0^T \left(\int_0^{r_0} v_j(H, x_2, t) \sigma_{1j}(H, x_2, t) dx_2^2 \right) dt, \quad (3)$$

$$W_R = 2\pi R \int_0^T \left(\int_0^H v_j(x_1, R, t) \sigma_{j2}(x_1, R, t) dx_1 \right) dt, \quad W_V = \int_V \left(\rho \frac{v_1^2 + v_2^2}{2} + W \right) dV.$$

В результате численных экспериментов при различных параметрах сетки и размерах области V выяснилось, что диссипация энергии оказывает существенное влияние даже на достаточно мелких сетках. В табл.1 приведена зависимость диссипации от размеров области V (рис.2) с фиксированным углом $\theta = \pi/4$ для равномерной сетки с числом узлов 1000×1000 и вычислительной области размером $20 \text{ м} \times 20 \text{ м}$, радиус плиты сейсмоисточника $r_0 = 0.57 \text{ м}$.

Таблица 1

Зависимость диссипации энергии от размера области V

H , м	D_V , Дж	W_0 , Дж	D_V/W_0
3	0.176912E+03	0.703083E+03	0.252
6	0.211205E+03	0.703083E+03	0.300
9	0.239209E+03	0.703083E+03	0.340
12	0.262274E+03	0.703083E+03	0.372
15	0.281849E+03	0.703083E+03	0.401

Расчёт зависимости диссипации от размеров области V показывает, что с увеличением размеров области диссипация возрастает. Стоит отметить, что большая часть диссипируемой энергии возникает вблизи зоны действия источника.

Для более точного расчёта зависимостей (3) предлагается использовать метод экстраполяции Ричардсона. Выясним, с каким порядком k уменьшается схемная диссипация с измельчением сетки:

$$k = \log_2 \frac{D_V(N)}{D_V(2N)}.$$

Уточним зависимости (3), предполагая, что они меняются с тем же порядком k по формуле:

$$W^*(N) = \frac{2^k W(2N) - W(N)}{2^k - 1}. \quad (4)$$

Такой подход позволяет уменьшить до нуля величину диссипации D_v^* , что обеспечивает выполнение закона сохранения. Уточнённые энергетические зависимости позволяют более точно вычислить сейсмический КПД.

Под сейсмическим КПД понимается отношение потока энергии через нижнюю часть области W_{H_i} к потоку энергии через поверхность грунта W_0 . Применяя процедуру (4) к энергетическим потокам, получим уточнённое значение сейсмического КПД:

$$\kappa = \frac{W_{H_i}}{W_0}. \quad (5)$$

На рис.3 приведены графики зависимости сейсмического КПД от глубины области $H_i = 3, \dots, 30$ м с фиксированным углом $\theta = \pi/4$. Размер вычислительной области – $50 \text{ м} \times 50 \text{ м}$, число узлов – 1000×1000 . Рассматривались две разные однородные среды: грунт ($\rho = 2400 \text{ кг/м}^3$, $c_p = 4500 \text{ м/с}$, $c_s = 2700 \text{ м/с}$) и твёрдый грунт ($\rho = 2600 \text{ кг/м}^3$, $c_p = 6000 \text{ м/с}$, $c_s = 3500 \text{ м/с}$). Сплошными линиями показаны зависимости с учётом уточнения значений интегралов, входящих в формулу (5), пунктирными линиями – исходные зависимости.

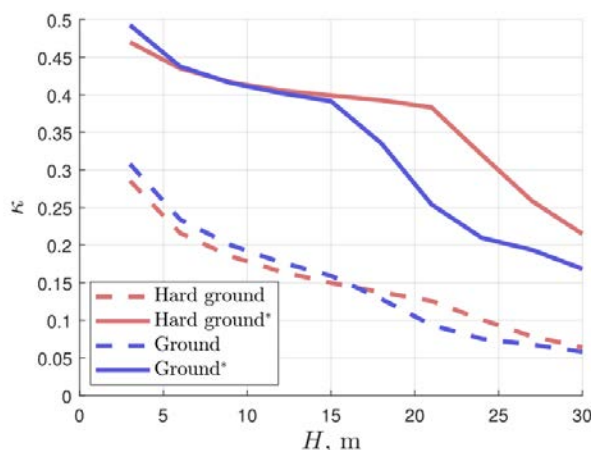


Рис.3. Зависимость сейсмического КПД от глубины.

Список литературы

1. Sadovskaya O. Mathematical Modeling in Mechanics of Granular Materials / O.Sadovskaya, V.Sadovskii. — Advanced Structured Materials, vol. 21. — Springer, Heidelberg – New York – Dordrecht – London, 2012. — 390 p.
2. Садовский В.М. Программный комплекс для решения двумерных упругопластических задач динамики сыпучих сред (2Dyn_Granular) / В.М.Садовский, О.В.Садовская // Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2012613989 от 28.04.2012. — RU ОБПБТ № 3 (80). — М.: ФИПС, 2012. — С. 209.
3. Sadovskii V.M. Analysis of seismic waves excited in near-surface soils by means of the electromagnetic pulse source “Yenisei” / V.M.Sadovskii, O.V.Sadovskaya, E.A.Efimov // Materials Physics and Mechanics. — 2019. — V. 42, No. 5. — P.544–557.
4. Sadovskii V.M. Finite-difference schemes for the analysis of longitudinal waves based on axially symmetric equations of the dynamic elasticity / V.M.Sadovskii, O.V.Sadovskaya, E.A.Efimov // Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics. — 2020. — Т.13. — № 5. P.1 – 11. (в печати)
5. Марчук Г.И. Методы расщепления / Г.И.Марчук. — Москва: Наука, 1988. — 263 с.

МНОГОЭЛЕМЕНТНЫЙ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЦЕПНЫХ МОДЕЛЕЙ

Каганович Б.М., Стенников В.А., Зароднюк М.С., Барахтенко Е.А.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева Сибирского отделения Российской академии наук (ИСЭМ СО РАН),

thermo@isem.irk.ru, sva@isem.irk.ru, max@isem.irk.ru, barakhtenko@isem.irk.ru

Основным способом упрощения и облегчения анализа и описания явлений и закономерностей действительности является дробление пространства искомых переменных. В «Математических началах натуральной философии» Ньютона [1] методом такого дробления стало предложенное им и Лейбницем дифференциальное исчисление, позволяющее переходить от исследования криволинейных зависимостей между функциями к прямолинейным. Конечно, менее распространенным, чем дифференцирование, но тоже широко используемым сделалось использование обязательно потенциального одномерного цепного пространства. Возможности и эффективность одномерного моделирования резко возрастают в современную компьютерную эпоху. Сейчас часто оказывается допустимым вместо бесконечно малых использовать ничтожно малые, но конечные отрезки. При достигаемой на них простоте описаний увеличение до большого числа шагов вычислений не вызывает существенных трудностей. В работах Института систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН (ИСЭМ СО РАН) открывающиеся возможности реализуются путем применения принципа равновесия [2–14], который Эйлер и Лагранж использовали в качестве исходного для единого формализованного описания классической механики [15, 16]. По сравнению с Эйлером и Лагранжем в ИСЭМ СО РАН понятие равновесности служит для анализа необратимых процессов, что противоречит распространенному мнению о принципиальной неприменимости равновесного моделирования в таком анализе. Авторы данного доклада с этим мнением не согласны. Согласно третьему ньютоновскому закону действие всегда равно противодействию и, следовательно, все процессы равновесны. Равновесие только исключительно трудно описать, когда на исследуемые системы действует много сил, подчиняющихся разным закономерностям. Дробление изучаемого суммарного процесса на множество шагов может возникающие трудности значительно ослабить. Идеи преодоления отмеченных трудностей подсказывали уже Эйлер и Лагранж. Эйлер при выводе из уравнения равновесного состояния Лагранжа уравнения оптимальной траектории [15] вместо зачастую затруднительного интегрирования использовал операцию суммирования с выбором для отдельных шагов легко дифференцируемых простейших формул. В виде непрерывной последовательности равновесных шагов, подчиняющихся уравнению экстремального состояния, представлял траектории и Лагранж. Сейчас поиск общего уравнения экстремальной траектории, который не удалось осуществить классикам физики XX века, может быть заменен построением такой траектории с помощью метода динамического программирования (ДП). Понятно, что при ничтожно малых размерах конечных шагов с помощью ДП без каких-либо затруднений реализуются возможности

равновесных моделей. ДП оказывается исключительно полезным не только с вычислительной точки зрения, но и в отношении выяснения рассматриваемых закономерностей. Наряду с использованием в многошаговом построении траекторий в многомерном пространстве ДП стал использоваться в ИСЭМ СО РАН и в одномерном термодинамико-цепном моделировании [17]. При этом одновременно с моделями реальных систем все большее внимание уделяется разработке условных. Условные модели оказались наиболее легко реализуемыми в решении задач загрязнения атмосферы.

Одна из получивших применение термодинамико-цепная модель имеет вид [18]:

$$\text{найти} \quad \text{extr}(1/T) \sum_{i=1}^n z_i x_i^{\beta+1} \quad (1)$$

$$\text{при условиях} \quad Ax = 0, \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^n P_i^{\text{mov}} x_i - \sum_{i=1}^n z_i x_i^{\beta+1} = 0, \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^n z_i x_i^{\beta+1} - K(T - T_{\text{env}}) = 0, \quad (4)$$

где T и T_{env} – температуры потока и окружающей среды; x_i – вектор потоков на ветвях; $A = [a_{ij}] - (m-1) \times n$ – матрица соединений независимых узлов и ветвей; m – число узлов; n – число ветвей; i – индекс компонента потока; z_i – сопротивление; P^{mov} – вектор движущих давлений; K – коэффициент в формуле теплопередачи $q = K(T - T_{\text{env}})$.

Целевая функция (1) имеет смысл энтропии движущегося вещества. Уравнения (2) и (3) представляют материальный и энергетический баланс цепи. (4) – равенство работы трения возникающей в результате ее совершения теплоте, увеличивающей энтропию изолированной системы (цепь плюс окружение).

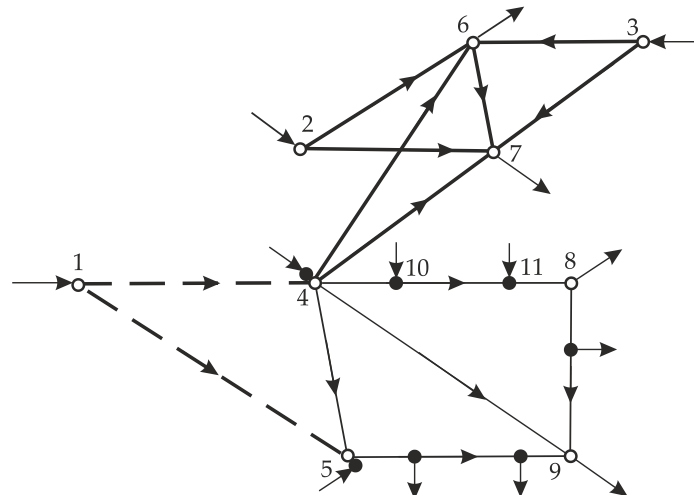


Рис. Интегрированная энергетическая система (1, 4, 5 – сеть транспорта энергоносителей; 2, 3, 4, 6, 7 – электрическая сеть с узлами выработки и потребления; 4, 5, 8, 9 – гидравлическая сеть; 10, 11 – узлы притоков поллютантов)

Надежды на обширность области приложений приведенной модели вселяет универсальность лежащих в ее основе принципов экстремальности, сохранения и равновесия. Целевая функция (1) может быть представлена в виде произведения множителя $1/T$ на сумму многих слагаемых различной природы, являющихся составными частями единой системы. Если предмет моделирования относится к энергетике, то этими частями, например, могут стать нефтепроводы, газопроводы, железнодорожный и автомобильный транспорт угля, электрические сети и другие виды транспорта энергии. Все эти виды отображаются одномерными термодинамико-цепными блоками.

На сегодня возможности одномерного моделирования начали реализовываться в исследованиях интегрированных энергетических систем (ИЭС) [19] и процессов антропогенного загрязнения атмосферы. Анализ, с помощью (1)–(4) ИЭС является наиболее естественным, поскольку последние как и многоэлементные (предназначенные для расчета потокораспределения в системах с потоками разной природы) модификации этой модели являются объединениями частей с различными физическими или технико-экономическими характеристиками. Схема ИЭС, включающая три блока, отличающиеся природой один от другого, приведена на рис.

В дальнейшей термодинамико-цепной анализ ИЭС должны содержаться и подобные приведенной простейшие схемы и более детальные, позволяющие оптимизировать структуру энергосистем. С учетом текущих проблем развития энергетики необходимо учитывать и технические, и экономические, и социальные, и экологические факторы. Надо оценивать влияние принимаемых решений на народное хозяйство и на жизнь людей. Среди новых актуальных конкретных задач можно называть: 1) уже отмеченную оптимизацию транспортных подсистем; 2) выбор схем кондиционирования воздуха в жилых, общественных и производственных помещениях, обеспечивающих поддержание допустимых концентраций загрязнителей; 3) определение уровней образования и распространения загрязнителей в атмосфере в районах расположения ИЭС; 4) оптимизацию общей структуры производства, транспорта и потребления энергии и энергоносителей.

Построение моделей, для анализа перечисленных задач включает две основных составляющих: связанную с непосредственным выполнением намеченных целей исследования и с математическим обеспечением возможностей этого выполнения. В математической составляющей актуальной и сложной является оценка точности вычислительных экспериментов в зависимости от особенностей ведущейся работы и особенностей самой модели. В особенностях цепных моделей важнейшими, разумеется, являются уровень детализации выбранной схемы и ее вид. Первые созданные термодинамико-цепные модели выявили возможности проведения с их помощью достаточно содержательного анализа при выборе простых малоконтурных схем, подобных приведенной на рисунке. Основным результатом расчетов стал выбор схем и параметров транспортных энергетических сетей. Схемы были определены для каждого из трех конкурирующих энергоносителей. В состав схем вошли узлы производства и потребления энергии и соединяющие их пути. В качестве искомых переменных выбраны потоки на ветвях как потоки в проводимых расчетах рассматривались и

продукты производства, и образуемые загрязнители, т.е. решались технико-экономическая и экологическая задачи.

В решенных пока термодинамико-цепных задачах можно выделить три этапа: выбор схемы гидравлической цепи, построение математической модели, решение математической задачи. Первый этап, как и два последующих в значительной мере имеет математический характер, поскольку от него зависит выполнимость остальных. В дальнейшем развитие искусства его проведения особое внимание надо уделить анализу влияния уровня детализации схем на точность полученных результатов. В схемах кроме расположения узлов и ветвей должны варьироваться и мощности отдельных производителей энергии.

В перспективе должна увеличиваться доля условных, абстрактных моделей, предназначенных для разработки методов исследования объектов, которые обладают особенностями, не поддающихся анализу с помощью уже разработанных стандартных алгоритмов. Это прежде всего касается анализа загрязнения атмосферы, моделирование которого уже проводится. Его верность проверяется сопоставлением результатов расчетов реальных объектов с замерами их параметров.

В целом уже приобретенный опыт термодинамико-цепного моделирования свидетельствует о необходимости значительного расширения области его применений. Он должен оказаться полезным и в научных исследованиях, и в инженерной практике, и в преподавании термодинамики и других дисциплин. Конечно, отмеченные трудности будут затруднять и рост полезного употребления. Поэтому надежды на светлое будущее одномерных цепных моделей могут оправдаться только в случае участия в их создании и использовании широкого круга специалистов.

Список литературы

1. Ньютон И. Математические начала натуральной философии. – М.: Наука, 1989. – 688 с.
2. Анциферов Е.Г. Применение методов математического программирования в анализе термодинамических систем: Автореферат дис. ... д-ра физ.-мат. Наук. – М., 1991. – 30 с.
3. Каганович Б.М. Дискретная оптимизация тепловых сетей. – Новосибирск: Наука, 1978. – 88 с.
4. Каганович Б.М. Равновесная термодинамика. Проблемы и перспективы. Вторая редакция. – LAP Lambert Academic Publishing? Saarbrücken, 2015. – 240 с.
5. Каганович Б.М., Воропай Н.И., Стенников В.А., Зароднюк М.С. Термодинамика, теория цепей и их совместные применения в физико-химических и энергетических исследованиях // Изв. АН Энергетика, - 2014. - №5. – С. 3-15.
6. Каганович Б.М., Зароднюк М.С. Равновесное пошаговое построение «механической теории теплоты» // Моделирование неравновесных систем: Материалы XVI Всероссийского семинара «Моделирование неравновесных систем – 2014». – Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН, 2014. – С. 59-64.

7. Каганович Б.М., Меренков А.П., Балышев О.А. Элементы теории гетерогенных гидравлических цепей. – Новосибирск: Наука, 1997. – 120 с.
8. Каганович Б.М., Филиппов С.П. Равновесная термодинамика и математическое программирование. – Новосибирск: Наука. Сиб. Отделение, 1995. – 236 с.
9. Каганович Б.М., Филиппов С.П., Анциферов Е.Г. Моделирование термодинамических процессов. – Новосибирск: Наука, 1993. – 101 с.
10. Каганович Б.М., Филиппов С.П., Анциферов Е.Г. Эффективность энергетических технологий: термодинамика, экономика, прогнозы. – Новосибирск: Наука, 1989. – 256 с.
11. Горбань А.Н., Каганович Б.М., Филиппов С.П. Термодинамические равновесия и экстремумы: Анализ областей достижимости и частичных равновесий в физико-химических и технических системах. – Новосибирск: Наука, 2001. – 296 с.
12. Gorban A.N., Kaganovich B.M., Filippov S.P., Keiko A.V., Shamansky V.A., Shirkalin I.A. Thermodynamic Equilibria and Extrema Analysis of Attainability Regions and Partial Equilibria. – Springer. 2006 – 282 p.
13. Kaganovich B.M., Keiko A.V., Shamansky V.A. Equilibrium Thermodynamic Modeling of Dissipative Macroscopic Systems // Advances in Chemical Engineering. Thermodynamics and kinetics of complex systems. Vol. 39. Chapter 1 – Elsevier, 2010. – P. 1-74.
14. Kaganovich B.M., Keiko A.V., Shamansky V.A., Zarodnyuk M.S. On the Interrelations Between Kinetics and Thermodynamics as the Theories of Trajectories and States // Chemical Kinetics. – Rijeka: Intech, 2012. – P. 31 – 60.
15. Эйлер Л. Диссертация о принципе наименьшего действия с разбором возражений славнейшего проф. Кёнига, выдвинутых против этого принципа // Вариационные принципы механики. / Под ред. Л.С. Полака. – М.: Физматгиз, 1959. – С. 96–108.
16. Лагранж Ж. Аналитическая механика. – М. – Л.: ГИТТЛ, 1950. – Т. 1. – 594 с.; Т.2 – 440 с.
17. Каганович Б.М., Стенников В.А., Зароднюк М.С., Барахтенко Е.А. Условное термодинамико-цепное моделирование в энергетических исследованиях // Материалы XXII Всероссийского семинара "Моделирование неравновесных систем – 2019", 4–6 октября 2019. – Красноярск: ИВМ СО РАН, 2019. – С. 55–58.
18. Каганович Б.М., Стенников В.А., Зароднюк М.С., Якшин С.В. Равновесное моделирование транспортных интегрированных энергетических систем // Материалы XII Международной конференции по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (NPNJ'2018), 24–31 мая 2018г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ, 2018. – С. 200–202.
19. Каганович Б.М., Зароднюк М.С., Якшин С.В., Барахтенко Е.А. Термодинамико-цепное моделирование загрязнения атмосферы // Материалы XXI Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2019), 24–31 мая 2019 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ, 2019. – С. 66–68.

ВЛИЯНИЕ ИСХОДНЫХ ДАННЫХ НА ВЫБОР «НАИХУДШИХ» СЦЕНАРИЕВ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ РАСЧЕТОВ ПО ОЦЕНКЕ ПОЖАРНОГО РИСКА

Е.С.Калинин

Институт вычислительного моделирования СО РАН, *kalinin009_1995@mail.ru*

В настоящий момент в практику решения задач пожарной безопасности на законодательном уровне введена процедура расчета пожарных рисков [1], включающая выполнение компьютерного моделирования развития пожара и эвакуации. Существует регламентированная процедура, согласно которой проводится расчет пожарного риска для объекта, который в свою очередь включает в себя расчет распространения опасных факторов пожара (ОФП) и эвакуации и их совместный анализ. Согласно теории оценки рисков, выбираются «наихудшие» сценарии, и для них выполняется моделирование. Сценарий пожара представляет собой вариант развития пожара с учетом принятого места возникновения и характера его развития. Сценарий пожара определяется на основе данных об объемно-планировочных решениях, размещении горючей нагрузки и людей на объекте. При расчете рассматриваются сценарии пожара, при которых реализуются наихудшие условия для обеспечения безопасности людей. Но проблема заключается в том, что понятие «наихудший» сценарий слабо формализовано, отсутствуют четкие критерии выбора притом, что наихудшие условия определяются совокупностью многих факторов. Процесс выбора сценария является непростой задачей, поскольку не формализован и основывается на экспертном выборе. В тоже время набор рассмотренных сценариев определяет качество анализа и выводов о состоянии объекта.

Поскольку проведение расчетов по определению вероятности эвакуации для всех возможных сценариев развития пожара является практически невыполнимой задачей, в Методике [2] даны рекомендации по выбору необходимых сценариев. К ним относятся: выбор данных сценариев осуществляется экспертным путем. В качестве сценариев с наихудшими условиями пожара следует рассматривать сценарии:

- 1) в помещениях, рассчитанных на одновременное присутствие 50 и более человек;
- 2) в системах помещений, в которых из-за распространения ОФП возможно быстрое блокирование путей эвакуации (коридоров, эвакуационных выходов и т.д.);
- 3) в помещениях и системах помещений атриумного типа;
- 4) в системах помещений, в которых из-за недостаточной пропускной способности путей эвакуации возможно возникновение продолжительных скоплений людских потоков.

Следуя лишь этим общим рекомендациям, которые не учитывают характерных особенностей конкретного объекта либо же вовсе не встречаются на объекте, возникает очевидный вопрос: в достаточной ли мере сформирован набор таких сценариев, исходя из анализа которых нужно будет делать выводы о безопасности объекта в случае возникновения пожара; какие критерии характеризуют полноту набора сценариев.

При проведении расчетов по оценке пожарного риска для общественных зданий и сооружений, уже на начальном этапе, при задании исходных данных для расчета распространения ОФП и эвакуации, могут возникать вопросы по выбору тех или иных значений.

Рассмотрим ситуации на примере исходных данных для расчета распространения ОФП. К ним относятся: место возгорания (помещение, этаж), площадь горючей нагрузки, площадная плотность горючей нагрузки, характеристики горючей нагрузки, расчетная область, объем расчетной области, граничные условия, описывающие связь с внешней средой, условия на дверные проемы внутри расчетной области, граничные условия, описывающие теплообмен с ограждающими

конструкциями здания, начальная температура внутри расчетной области (здания), температура внешней среды и др. Варьируя каждый из этих параметров в конечном счете можно получать совершенно разный результат.

На примере параметра «расчетная область» рассмотрим следующие случаи: объект – станция скорой помощи. Имеет два этажа, коридорного типа, связь между этажами осуществляется через открытую лестничную клетку. В первом случае в расчетную область для расчета распространения ОФП включены только помещение с очагом пожара, лестничная клетка и коридоры, связывающие помещения на этажах (двери, ведущие из помещений в коридоры, являются закрытыми). Во втором случае рассмотрен случай, когда в расчетную область включены все помещения, в которых находились люди в процессе эвакуации (все двери внутри здания считаются открытыми) (Рис. 1).

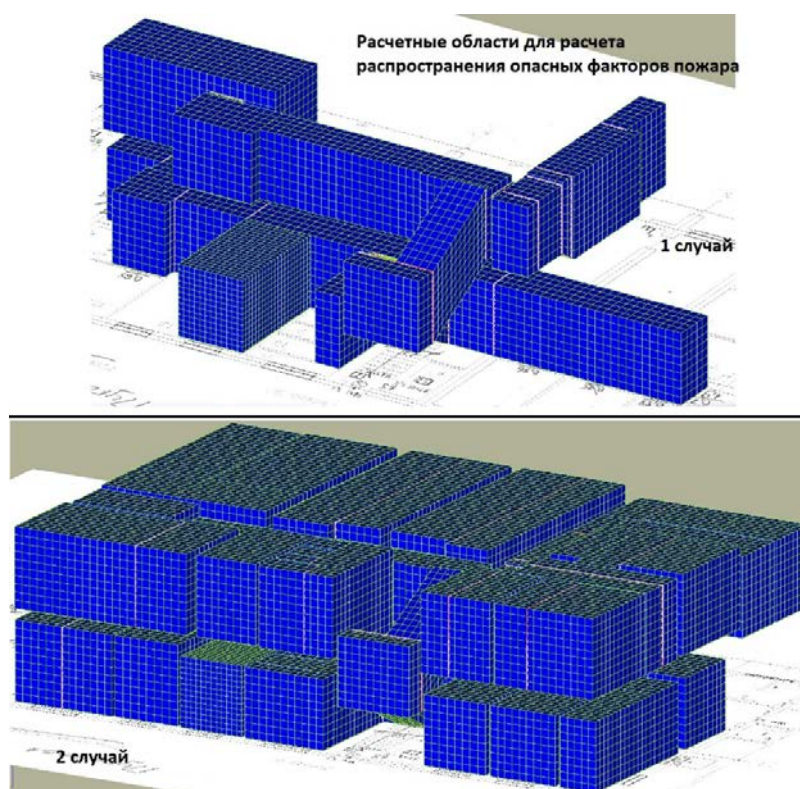


Рис.1. Расчетные области (сетки) для расчета распространения ОФП для рассматриваемых ситуаций.

Все остальные параметры в рассматриваемых сценариях были неизменными. В первом случае объем расчетной области составил 334.8683 м^3 , во втором - 1377.056 м^3 . Как правило, блокирование путей эвакуации в первую очередь происходит по потере видимости (достижению оптической плотностью дыма критического значения). На срезе поля оптической плотности дыма можно увидеть, насколько сильно изменилась картина в коридоре первого этажа уже на 120 секунде развития пожара (Рис. 2). Поскольку дым может беспрепятственно проникать через открытые проемы в помещения, его концентрация в коридоре снижается, и коридор дольше остается безопасным для эвакуации. Исходя из полученного результата можно сделать вывод, что ситуация в первом случае является более опасной и следует выбрать такой вариант в качестве «наихудшего» при задании расчетной области. И, поскольку сам по себе объект небольшой, динамика распространения ОФП сильно чувствительна к объему расчетной области, что, в конечном счете, может оказать существенное влияние на безопасность эвакуации.

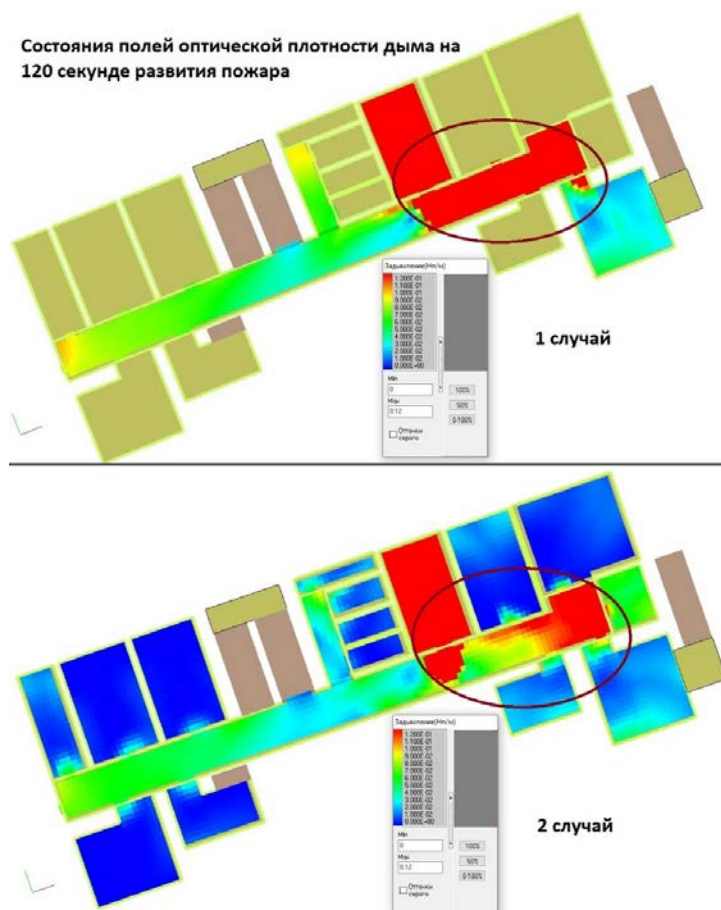


Рис. 2. Срезы полей оптической плотности дыма на 120 секунде. Срезы полей оптической плотности дыма выполнены на отметке 1,7 м от уровня пола этажа. Цвет полей изменяется от синего (безопасного) до красного (критического).

Исходя из вышесказанного, можно сделать вывод, что существующий подход по выбору «наихудших» сценариев не отражает всего многообразия исходов в сценариях. Поэтому требуется более детальное рассмотрение вопроса по составлению набора «наихудших» сценариев для проведения расчетов по оценке пожарного риска. Систематизировав исходные данные об объекте и данные, полученные в ходе проведения подобных расчетов, может быть предложена система, задачей которой будет являться помощь в выборе «наихудших» сценариев, что значительно увеличит качество выводов в основе которых лежат расчеты по оценке пожарного риска как для проектируемых объектов, так и для эксплуатируемых.

Список литературы

1. Технический регламент о требованиях пожарной безопасности [Текст]: федер. закон от 22 июля 2008г. № 123-ФЗ // Рос. газета. – 2008. – 1 августа. – С. 12.
2. Пособие по применению "Методики определения расчетных величин пожарного риска в зданиях, сооружениях и строениях различных классов функциональной пожарной опасности" [Текст]: пособие / А.А.Абашкин [и др.]. - 2-е изд., испр. и доп. - М.: ВНИИПО, 2014. - 226 с.
3. Министерство Российской Федерации по делам гражданской обороны, чрезвычайным ситуациям и ликвидации последствий стихийных бедствий [Электронный ресурс] : сайт. – Москва, 2020. – URL: <https://www.mchs.gov.ru/> (дата обращения: 25.09.2020).

MATHEMATICAL MODELLING OF IONIC CONDUCTIVITY IN NANOPOROUS MEMBRANES WITH CONSTANT SURFACE POTENTIAL¹

A.I. Krom¹, M.I. Medvedeva², I.I. Ryzhkov^{1,2}

¹ Institute of Computational Modelling SB RAS, Krasnoyarsk, kai@icm.krasn.ru

² Siberian Federal University, Krasnoyarsk

The membrane processes are in demand in many industries, such as chemical, fuel, energy, food and pharmaceutical. Ion transport through membranes occurs in the separation of mixtures, electrochemical energy conversion, and chemical sensors. One of the research directions is the preparation of ‘smart’ membranes, which can change their properties under external influence, such as electric field [1–3].

In this paper, the model of electrolyte flow through the membrane, which separates two reservoirs with given salt concentrations, is considered. The motion is induced by an electric field. The electric field is applied, so, there is an electric potential difference between the reservoirs, which is the reason of electrolyte ions motion through the nanopore. We assume that the electric double layer in the electrolyte consists of the diffuse layer and the Stern layer just near the wall, where water molecules are oriented under high electric field [4].

The thickness of diffuse layer is determined by the Debye length $\lambda = \sqrt{\varepsilon \varepsilon_0 R_g T / 2 F^2 C_* / R_p}$, where ε is the relative permittivity, ε_0 is the electric constant, R_g is the universal gas constant, T is the temperature, F is the Faraday's constant and C_* is the reference concentration taken as $C_* = 1 \text{ mol/m}^3$. If the pore radius is comparable with Debye length, then the concentration of anions (cations) will prevail inside the pore with positive (negative) charge on the wall. Thus, we can tune the ion transport through the pores by changing the surface potential.

The membrane is modelled as an array of parallel cylindrical nanopores. Thus, it is enough to calculate ion transport through a single nanopore only.

Let us construct two-dimensional (2D) Space charge model, which is based on the system of Navier-Stocks, Nernst-Plunk, and Poisson stationary equations. The ions in the nanopore are transported by convection, diffusion, and migration in electric field. The fluxes of ions are written as

$$\mathbf{J}_{\pm} = C_{\pm} \mathbf{U} - D_{\pm} \nabla C_{\pm} \mp (D_{\pm} F / R_g T) C_{\pm} \nabla \Phi,$$

where $C_{\pm}$ are the concentrations of cations and anions, P is the pressure, Φ is the potential, $\mathbf{U}$ is the velocity vector, $\mathbf{J}_{\pm}$ are the cation and anion fluxes and $D_{\pm}$ are diffusion coefficients of cations and anions. In what follows, we will need the dimensionless variables and

¹ The reported study was funded by Russian Foundation for Basic Research, Government of Krasnoyarsk Territory, Krasnoyarsk Regional Fund of Science, to the research project 18-48-242011 "Mathematical

quantities averaged over the pore cross-section. The dimensional average axial velocity is defined by $\bar{V} = \frac{2}{R_p^2} \int_0^{R_p} V R dR$.

The average pressure $\bar{P}$, ion concentrations $\bar{C}_\pm$, potential $\bar{\Phi}$, axial ion fluxes $\bar{J}_\pm$, total axial ion flux $\bar{J} = \bar{J}_+ + \bar{J}_-$, and axial charge flux $\bar{I} = \bar{J}_+ - \bar{J}_-$ are introduced in the same way. The corresponding dimensionless quantities are $\bar{v}$, $\bar{p}$, $\bar{c}_\pm$, $\bar{\phi}$, $\bar{j}_\pm$, $\bar{j} = \bar{j}_+ + \bar{j}_-$ and $\bar{i} = \bar{j}_+ - \bar{j}_-$.

The ionic conductivity G is defined by $G = I / U$, while the ionic current through the pore is given by $I = \pi R_p^2 F \bar{I}$, and U is the potential difference. The specific conductivity κ (S/m) of a cylindrical nanopore expressed through the dimensionless average charge flux and potential difference is written as

$$\kappa = \frac{D_* C_* F^2}{R_g T} \frac{\bar{i}}{\phi_L - \phi_R}.$$

The dimensionless potential ϕ , ion concentrations $c_\pm$ and pressure p are written as

$$\begin{aligned} \phi(r, z) &= \phi_v(z) + \psi(r, z), \quad c_\pm(r, z) = c_v(z) \exp(\mp \psi(r, z)), \\ p(r, z) &= p_v(z) + 2c_v(z) \cosh(\psi(r, z)), \end{aligned}$$

where the ion concentrations satisfy the Boltzmann distribution, the function ψ satisfies the Poisson equation with boundary condition of axial symmetry.

The relation of the average volume flux (or average axial velocity), average ion flux and average charge flux to the gradients of virtual pressure p_v , virtual chemical potential $\mu_v = \ln c_v$ and virtual electric potential ϕ_v can be written in the form of phenomenological flux–force formalism [5]:

$$\left(\frac{dp_v}{dz}, \frac{d\mu_v}{dz}, \frac{d\phi_v}{dz} \right)^T = L(\bar{v}, \bar{j}, \bar{i})^T$$

Here $L = -L_v^{-1}$ is the symmetric 3×3 matrix. The coefficients of matrix L_v depend on the function $\psi(r, z)$ and virtual concentration $c_v(z)$ [5]. These equations are supplemented by the boundary conditions in the reservoirs (equal ion concentrations, zero pressures and different potentials):

$$\begin{aligned} z=0: \quad & p_v = -2c_0, \quad c_v = c_0, \quad \phi_v = \phi_L, \\ z=1: \quad & p_v = -2c_0, \quad c_v = c_0, \quad \phi_v = \phi_R. \end{aligned}$$

The algorithm of numerical solution for the considered 2D problem was proposed and implemented.

When the nanopore radius is comparable with or less than the Debye length, the profiles of potential, ion concentrations, and pressure in the radial direction become almost uniform. In this case, one can neglect the radial dependence of all quantities. This approach is

known as Uniform potential model [5]. The relation between the charge σ induced on the diffuse layer boundary and the surface potential is given by $\sigma = C_s(\Phi_s - \Phi)$ [3-4], where C_s is the capacitance of the Stern layer. With the boundary conditions, which take into account the Donnan jumps of the potential and concentrations on the inlet and outlet of nanopore we obtain the one-dimensional (1D) problem, for which the algorithm of numerical solution was proposed and implemented as well.

We have investigated the ionic conductivity in an aqueous KCl solution for different surface potentials and pore radii. Fig. 1 shows the profiles of potential, ion concentrations, and pressure along the nanopore with radius of 2 nm. For the 2D model, the cross-sectionally averaged values are shown. The surface potential is positive, so the concentration of cations (anions) inside the nanopore is lower (higher) than in the bulk. The 1D and 2D models provide close results for potential and cation concentration profiles, while the variation of pressure and anion concentration along the pore are slightly higher in the 1D model. Note that the Debye length for $C_0 = 10$ mM is 3.04 nm, which is larger than the pore radius of 2 nm.

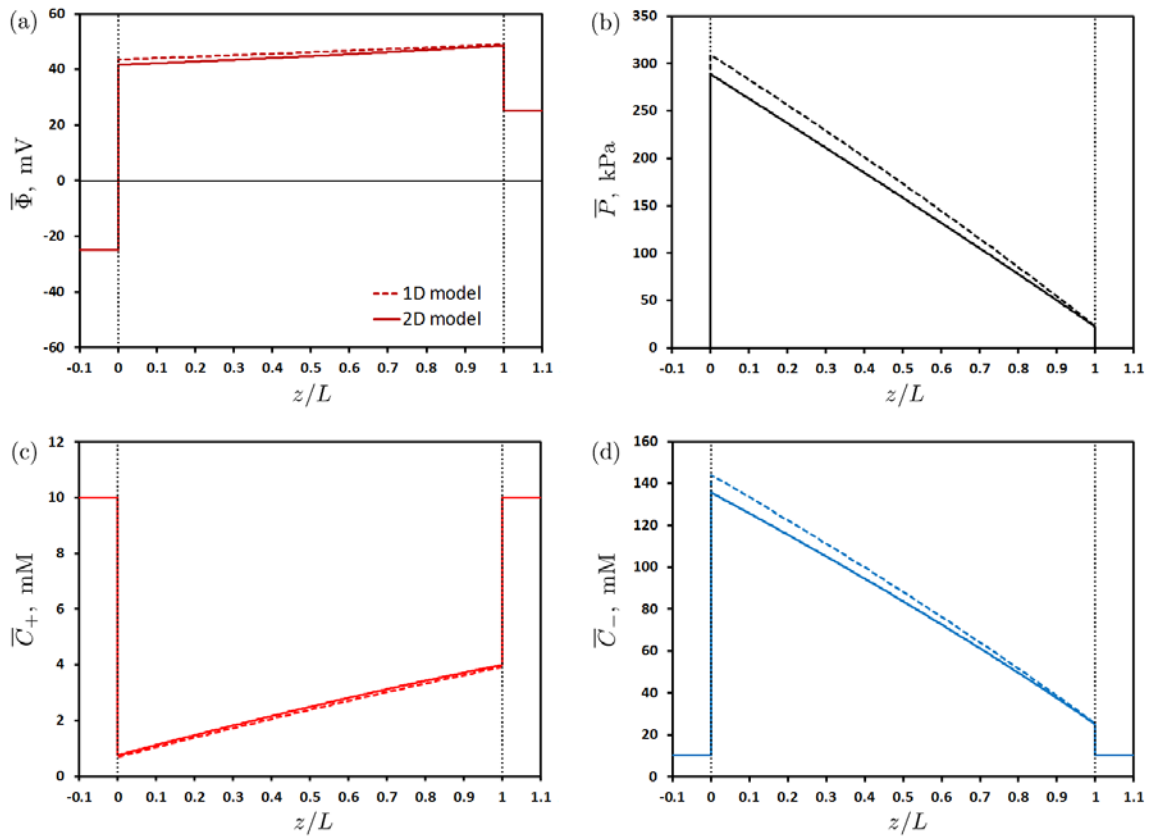


Fig. 1. The profiles of cross-sectionally averaged potential (a), pressure (b), concentrations of cations (c) and anions (d) along the nanopore with the radius $R_p = 2$ nm and surface potential $\Phi_s = 0.025$ V.

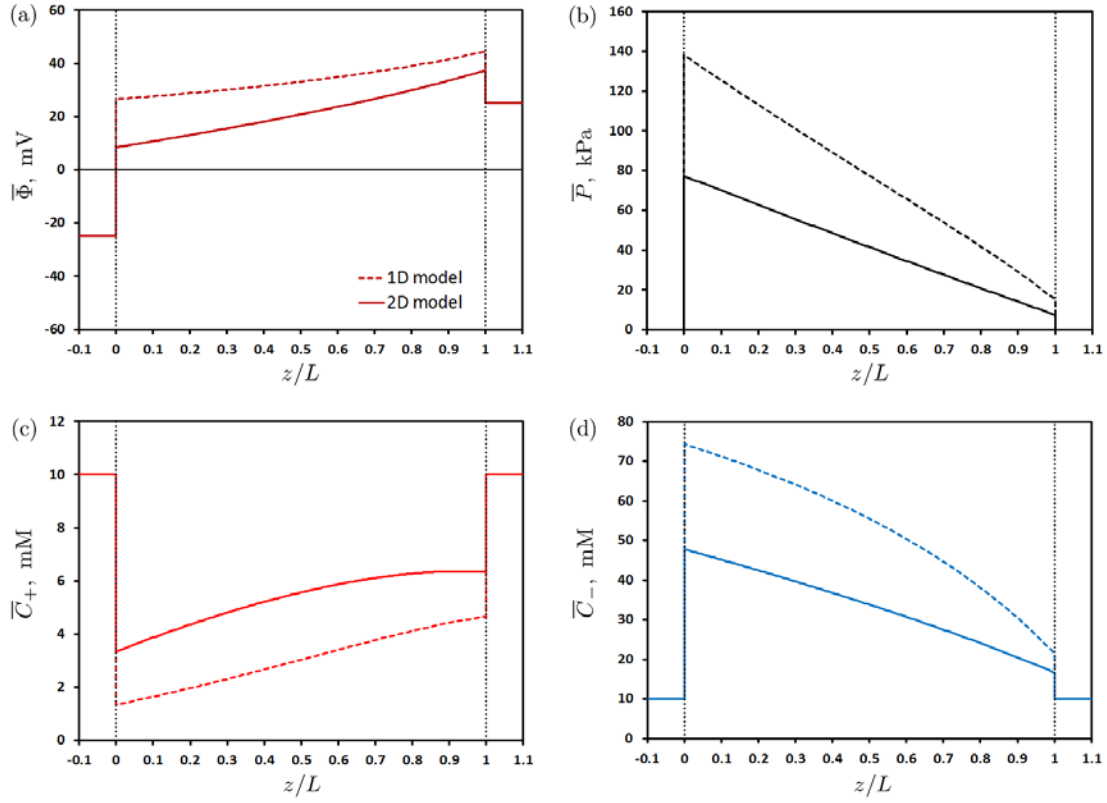


Fig. 2. The profiles of cross-sectionally averaged potential (a), pressure (b), concentrations of cations (c) and anions (d) along the nanopore with the radius $R_p = 10$ nm and surface potential $\Phi_s = 0.025$ V.

Figure 2 shows the profiles of all quantities in the nanopore of 10 nm radius. Here the 1D model leads to overestimated values of potential, pressure, and anion concentration, while the cation concentration is underestimated in comparison with the 2D model. In this case, the Debye length (3.04 nm) is smaller than the nanopore radius (10 nm). Thus, the decrease of potential and the corresponding radial variations of cation/anion concentrations in the 2D model lead in noticeable deviation of cross-sectionally averaged values from the 1D model.

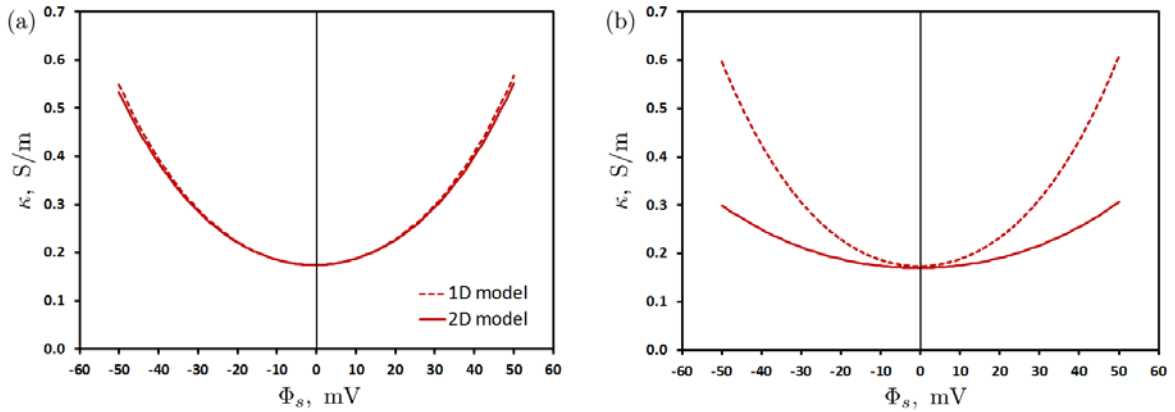


Fig. 3. The dependence of ionic conductivity on the surface potential for a nanopore with the radius $R_p = 2$ nm (a) and $R_p = 10$ nm (b).

The conductivity dependence on the applied surface potential for nanopores of 2 and 10 nm radius are shown in Fig. 3.

The increase of surface potential magnitude leads to the enhancement of conductivity. It occurs due to the increase of counter-ion concentration inside the nanopore and, consequently, the ionic current. The 1D and 2D models provide very close results since the Debye length (3.04 nm) is higher than the pore radius (2 nm). Nevertheless, the 1D model gives slightly higher conductivity values (Fig. 3a) due to higher concentration of counter-ions inside the nanopore in comparison with the 2D model, see Fig. 1d. For a nanopore with the radius of 10 nm (Fig. 3b), the pore radius exceeds the Debye length, and cross-sectionally averaged ion concentrations inside the nanopore in the 2D model deviate from the bulk reservoir values much smaller in comparison with the 1D model, see Fig. 2c,d. Thus, the 2D model provides much lower magnitudes of ionic conductivity except the region near $\Phi_s = 0$, where the nanopore is not charged. However, the qualitative dependence of conductivity on the applied potential is similar in both models.

In conclusion, we have developed 1D and 2D models for describing ionic conductivity of nanoporous membranes. A good agreement between these models is found when the nanopore radius is smaller than or comparable with Debye length. Both models show that the ionic conductivity becomes larger with increasing the magnitude of applied surface potential due to the increase of counter-ion concentration inside the nanopore. The obtained results can be applied in such processes as electrodialysis, capacitive deionization, and hydrogen energy conversion, where membranes with high conductivity are advantages.

References

1. Martin C.R. Controlling ion transport selectivity in gold nanotubule membranes / C.R.Martin, M.Nishizawa, K.Jirage, M.Kang, S.B.Lee // *Advanced Materials*. — 2001. — V.13. — P.1351 – 1362.
2. Lebedev D.V. Effect of electric field on ion transport in nanoporous membranes with conductive surface / D.V.Lebedev, V.S.Solodovnichenko, M.M.Simunin, I.I.Ryzhkov // *Petroleum chemistry*. — 2018. — V.58. — P.474 – 481.
3. Ryzhkov I.I. Modelling of conductive nanoporous membranes with switchable ionic selectivity / I.I.Ryzhkov, A.S.Vyatkin, E.V.Mikhлина // *Membranes and Membrane Technologies*. — 2020. — V.2. — P.10 – 19.
4. Zhang L. Theory of ion and water transport in electron-conducting membrane pores with pH-dependent chemical charge / L.Zhang, P.M.Biesheuvel, I.I.Ryzhkov // *Physical Review Applied*. — 2019. — V.12. — 014039.
5. Peters P.B., Analysis of electrolyte transport through charged nanopores / P.B.Peters, R.Van Roij, M.Z.Bazant // *Physical Review E*. — 2016. — V.93. — 053108.

ВЛИЯНИЕ ОБЪЁМНО-ПЛАНИРОВОЧНОГО РЕШЕНИЯ СТАДИОНА НА ДИНАМИКУ ДВИЖЕНИЯ ЛЮДЕЙ

В.А.Моисейченко

Институт вычислительного моделирования СО РАН, *slava.250894@gmail.com*

Стадион является объектом массового пребывания, в котором проводятся различные мероприятия: спортивные соревнования, концертно-зрелищные мероприятия, выставки, ярмарки, фестивали, конференции и т.п.

Такие объекты имеют ряд особенностей, которые идентифицируют их из многообразия зданий:

1. Трибунное пространство, его организация. Трибуны делятся на сектора, которые зачастую изолированы друг от друга ограждениями (отсечками), что затрудняет переход из одного сектора в другой.
2. Одновременное размещение на трибунах большого количества людей, которые к тому же находятся в возбуждённом эмоциональном состоянии.
3. Нахождение на объекте людей разных групп мобильности.
4. Зонирование объекта по доступу к различным клиентским группам.
5. Наличие VIP и VVIP зон, которые обособлены от остальных зрительских мест и имеют свои отдельные выходы наружу.
6. Наличие гостевого сектора при проведении спортивных соревнований. Гостевым сектором считается зона на трибуне, которая выделена для фанатов гостевой команды. Данная группа посетителей должна быть изолирована для предотвращения (минимизирования) фанатских стычек.
7. Посетители не знакомы с планировкой стадиона. Это важно потому, что на объектах массового пребывания, наибольшую опасность имеют те ситуации, которые требуют быстрого покидания людьми здания.

Исходя из особенностей стадионов, можно выделить следующие рискообразующие факторы:

1. Большое число людей в ограниченном пространстве.
2. Особенность организации трибунного пространства.
3. Отсутствие у людей знания планировки зданий.
4. Повышенный эмоциональный фон посетителей.
5. Одновременное (экстренное) покидание объекта.
6. В подавляющем количестве присутствуют люди (зрители), обучающие действия с которыми невозможны.

На объектах с массовым пребыванием людей основное внимание требует исследование и организация перемещения зрителей как наиболее массовой и неорганизованной клиентской группы во время спортивно-зрелищных и концертных мероприятий.

Возникают повышенные требования к подготовке инфраструктуры и информационного наполнения объекта с целью организации безопасного движения

людских потоков на объекте во время загрузки и выгрузки, включая экстренную эвакуацию вследствие ЧС.

Посредством компьютерного моделирования можно проиграть различные сценарии без риска нанести ущерб жизни и здоровью людей.

Одной из проблем при чрезвычайной ситуации является исключение части путей из эвакуации, поскольку они могут оказаться недоступными (блокируются опасными факторами пожара, разрушаются при взрыве и т.д.). Стадионы имеют сложную структуру, несколько уровней (этажей), помещения различной геометрической формы, поэтому модель вычислительной гидродинамики, применяемая для имитирования процесса развития пожара, является наиболее универсальным инструментом. С ее помощью можно рассчитать температуры, скорости, концентрации компонентов смеси, тепловые потоки и т.д. в каждой точке расчетной области [1]. Это позволит определить пути, которые станут недоступны для эвакуации в случае чрезвычайной ситуации.

Так как на объекте присутствуют посетители разных клиентских групп и групп мобильности, стоит задача учёта индивидуальных характеристик посетителей. Это позволяют сделать индивидуально-поточные модели движения людей, которые описывают движение каждого отдельного человека с учетом окружающей обстановки. Они позволяют учесть размеры и формы проекции людей, скорости свободного движения. Может быть учтена, согласно данным натурных наблюдений, зависимость скорости от возраста, эмоционального состояния, группы мобильности [2].

Приведём конкретный пример влияния объёмно-планировочного решения стадиона на движение людей во время разгрузки при проведении спортивного мероприятия. Объектом является футбольный стадион, рассчитанный на 15000 мест. В силу естественного рельефа местности прилегающая территория имеет перепад высот более чем 14 метров. На отметке 14.2 располагается внешний стилобат, вход на который осуществляется через КПП с восточной стороны, а на отметке 0 располагается территория стадиона, вход на которую осуществляется через западные КПП. Переход между территорией на отметке 0 и внешним стилобатом на отметке 14.2 осуществляется через наружные лестницы с западной и южной стороны стадиона.

Для исследования была построена 3D-модель стадиона. В качестве программного обеспечения использовался программный комплекс «Сигма ПБ», в котором реализованные вышеуказанные модели имитирования процесса развития пожара и движения людей [3].

Одной из особенностей данного стадиона является организация кругового движения по внешнему стилобату. Выход с трибун осуществляется через внутренний стилобат на отметке 14.2 в выходы на внешний стилобат на отметке 14.2. Далее организовано круговое движение по стилобату к восточным воротам либо к западной лестнице на отметку 0 и далее к западным воротам. Люди двигаются близко к ограждающим конструкциям здания, и, тем самым, препятствуют выходу, находящихся в здании посетителей, что приводит к существенным скоплениям у выходов на внешний стилобат.

Влияние кругового движения людей по стилобату на образование скоплений на выходах из здания наглядно можно увидеть на примере выходов A1 и A2 (Рис.1). Нагрузка на эти выходы одинаковая (примерно 1130 человек). Примерно к 100 секунде у этих выходов образуются существенные скопления по двум причинам:

1. Меньшая пропускная способность выходов по сравнению с интенсивностью подходящего потока. Это актуально для обоих выходов.

2. Направление движения людей по стилобату (зрители,двигающиеся по внешней части стилобата, препятствуют выходу тех, что находятся внутри здания). Это актуально для выхода A1.

Выход A2 освобождается уже к 290 секунде, т.к. из него люди выходят свободно. Выходу же из A1 препятствуют люди,двигающиеся по стилобату к западной лестнице, что приводит к освобождению этого выхода только на 410 секунде. Разница в освобождении этих выходов составляет порядка 120 секунд.

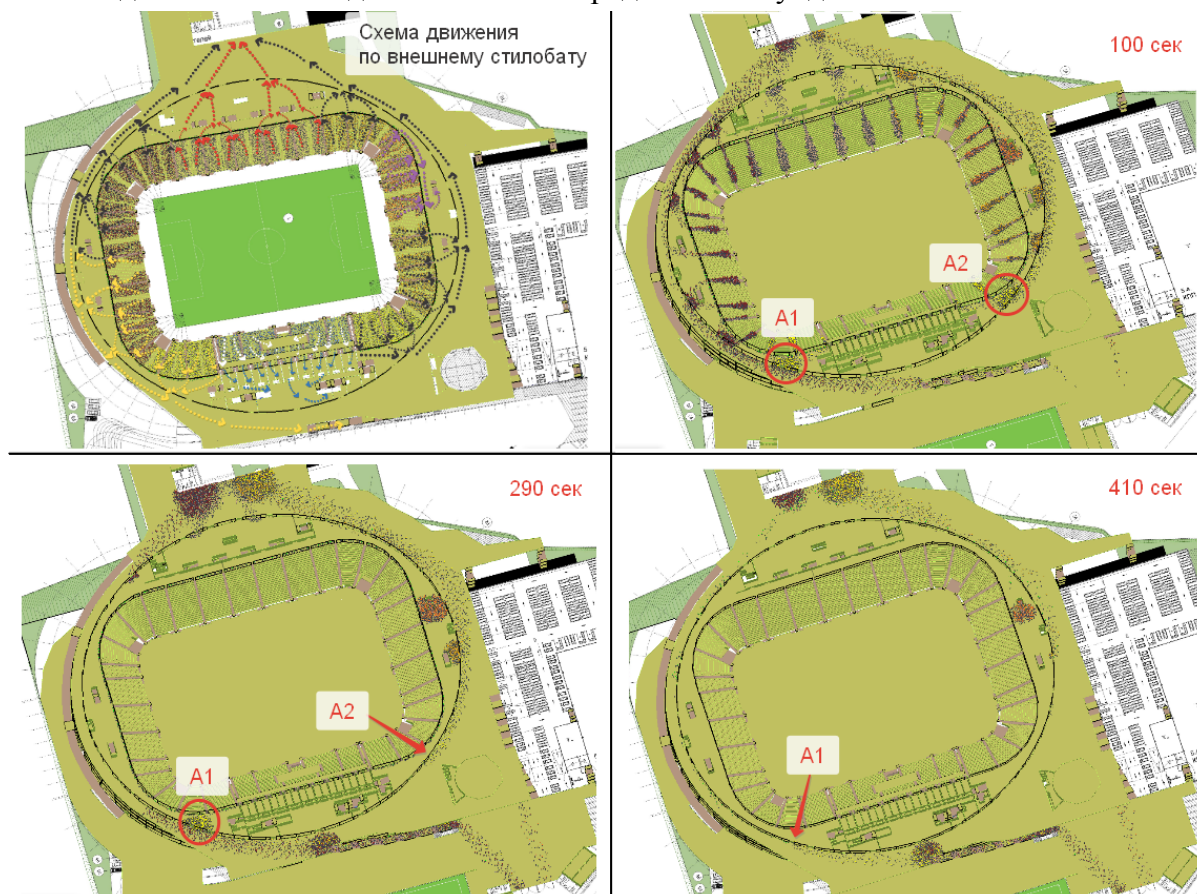


Рис.1. Схема движения по внешнему стилобату и состояние разгрузки на 100 секунде, 290 секунде и 410 секунде

Если с южной стороны можно разделить потоки с помощью ограждений для обеспечения беспрепятственного выхода людей из здания, то с северной стороны это сделать затруднительно из-за другой особенности стадиона – узкая северная часть внешнего стилобата (не более 5,5 метров, Рис.2).

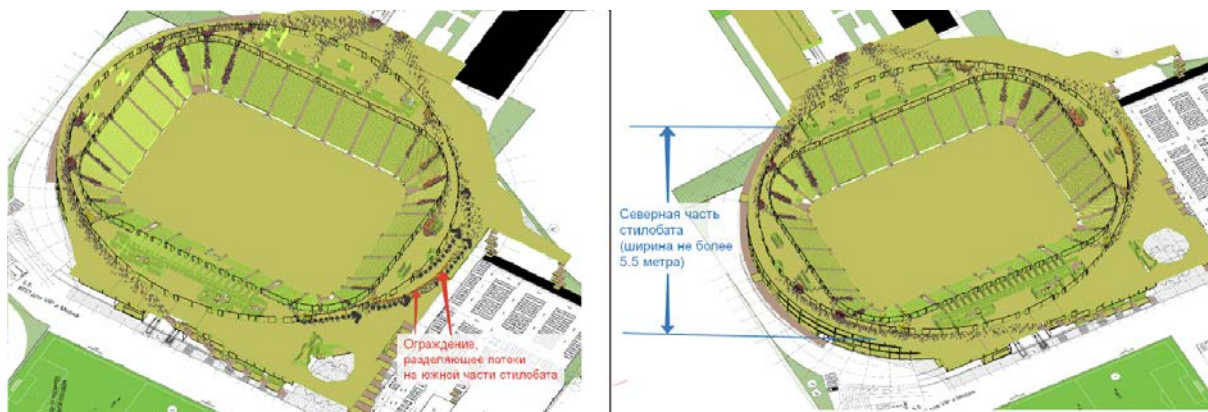


Рис.2. Движение потоков по внешнему стилобату с использованием ограждений на южной части

В северной части стилобата при движении формируется плотный поток, препятствующий выходу людей из здания. Поэтому организация движения северного сектора требует особого внимания. Необходимо направлять людей к южным и западным воротам и использовать поэтапную разгрузку этого сектора.

Таким образом, применив компьютерное моделирование пешеходных потоков есть возможность оценить влияние объёмно-планировочных решений на динамику движения людей. Появляется возможность увидеть «узкие» места объекта. На конкретном примере была рассмотрена особенность стадиона – круговое движение по стилобату. Определено, что такое решение провоцирует образование крупных и длительных скоплений (порядка 350 секунд).

Северная часть внешнего стилобата является довольно узкой (не более 5.5 метра), что не позволяет использовать какие-либо разграничения для разделения потоков, чтобы предотвратить образование скоплений.

Из всего вышесказанного можно сделать вывод о нежелательности одновременного начала движения. Следует организовать поэтапную разгрузку трибун. Особенно это касается северного сектора из-за узкого стилобат.

Подобный подход к анализу влияния объёмно-планировочного решения стадиона позволяет в полной мере изучить объект и оценить обстановку при тех или иных условиях, что поможет лучше обучить персонал объекта управлению людскими потоками.

Список литературы

1. Дектерев А.А. Моделирование динамики пожаров в спортивных сооружениях / А.А.Дектерев [и др.] // Пожарная безопасность. — 2007. — №4. С. 49-58.
2. Кирик Е.С. Тестирование компьютерных программ по расчету времени эвакуации на примере модуля SigmaEva / Е.С.Кирик, А.В.Малышев // Пожарная безопасность. — 2014. — №1. С. 78-85.
3. Литвинцев К. Ю. Расчетно-аналитический программный комплекс «Сигма ПБ» по моделированию развития пожара и эвакуации / К.Ю.Литвинцев [и др.] // Пожарная безопасность. — 2016. — №4. С. 51-59.

К ВОПРОСУ О РАСПРОСТРАНЁННОСТИ ТРАНСПОЗОНОВ В ГЕНОМАХ ХЛОРОПЛАСТОВ НЕКОТОРЫХ РАСТЕНИЙ

О.А. Мутовина¹, М.Г. Садовский^{1,2}

¹Сибирский федеральный университет, mutovina.ole4ka@mail.ru

²Институт вычислительного моделирования СО РАН, msad@icm.krasn.ru

Введение

К настоящему времени круг методов прочтения последовательности нуклеиновой кислоты значительно расширился. Стали возможным не только распознавание структуры ДНК, но и обнаружение в ней различных элементов. Многочисленные исследования и публикации [1 – 6] посвящены как самим элементам, их структуре, функциям, так и связям этих элементов с ДНК, исследованию влияния одного на другое и т.д. Несмотря на значительное число уже выявленных элементов нуклеиновых кислот, исследователи обнаруживают новые, тем самым увеличивая пространство всё новых объектов для исследований.

Одними из таких элементов являются транспозоны [1], которые представляют собой участки генетической последовательности, способные самостоятельно размножаться внутри генома и менять в нём своё положение. К настоящему времени транспозоны разных видов обнаружены в геномах практически всех организмов самого разного таксономического положения. Данные элементы встречаются с высокой частотностью (см. ниже обсуждение строго определения повышенной либо пониженной частоты) и могут существовать в нескольких копиях в одной последовательности. Длина данных элементов варьирует, может меняться в достаточно широких пределах весьма сложным образом, что является одним из важных процессов в эволюции этих генетических элементов. Достоверно известно, что транспозоны, как часть последовательности ДНК, содержатся в ядерном и митохондриальном геномах [6]. При этом вопрос о существовании транспозонов в геноме хлоропластов всё ещё является спорным [7].

Хлоропласты являются пластидами растений, обеспечивающими процесс фотосинтеза. Они возникли в результате эндосимбиоза организмов приблизительно 1 миллиард лет назад [Мереж]. В ходе эволюции геном предков хлоропластов претерпел значительные изменения: часть генома сохранилась, часть перешла в ядерный, а часть просто пропала в процессе эволюционных преобразований. Геном хлоропластов — это хороший объект для исследования эволюционных процессов растений, филогенетических связей, определения вида растения и его таксономического положения. Однако полностью геном хлоропластов, как уже говорилось ранее, всё ещё изучен недостаточно, и исследователи продолжают выделять в нём всё новые структурные элементы.

Целью данной работы является поиск и определение транспозонов в геномах хлоропластов растений, а также выявление связи между типом транспозона (если таковые найдутся в геномах хлоропластов) и таксономией носителя соответствующего генома. При этом под таксономией понимается систематическое положение растений; мы исследовали сравнительный состав транспозонов, обнаруженных в геномах хлоропластов покрытосеменных растений и голосеменных растений.

Материалы и методы

Последовательности геномов хлоропластов брались из NCBI Genome List. Для нашего исследования были взяты геномы хлоропластов только наземных растений; в

настоящее время в банке геномов NCBI депонировано 4251 последовательности таких геномов. Из этого множества геномов были выбраны 100, из которых часть принадлежала голосеменным растениям, а часть (примерно равная по численности) — покрытосеменным. Выбор конкретных видов голосеменных определялся научными интересами лаборатории лесной геномики СФУ. Поскольку одной из задач данного исследования является сравнение геномов хлоропластов по наличию/отсутствию транспозонов и связи этого показателя с таксономией, постольку одновременно исследовались геномы хлоропластов покрытосеменных растений. При этом такие геномы выбирались случайным образом. Отделу покрытосеменных растений принадлежат 14 семейств (*Злаки*, *Бобовые*, *Кленовые*, *Жимолостные*, *Мальвовые*, *Мориновые*, *Маслиновые*, *Амарантовые*, *Астровые*, *Барбарисовые*, *Лютиковые*, *Пасленовые*, *Хризобалановые*, *Никтагиновые*), отделу голосеменных — 2 семейства (*Сосновые* и *Кипарисовые*). Геномы скачивались в формате GenBank и использовались для дальнейшего анализа.

Поиск транспозонов осуществлялся программой *Sensor*, принимающей последовательности ДНК и белков. Для поиска последовательностей транспозонов использовалась библиотека *Repbase*. *Sensor* использует алгоритмы WU-BLAST или NCBI BLAST для поиска последовательностей в данной библиотеке. По умолчанию программа ищет фрагменты, имеющие даже отдаленное сходство.

Последовательности, взятые из NCBI Genome List, копировались в *Sensor*. Поскольку поиск транспозонов производился по образцу (т.е. подмножества последовательностей, депонированных в *Repbase*), постольку необходимо было определить допустимый уровень ошибок при поиске. Для этого необходимо выбрать источник последовательностей для поиска на основе дерева таксономии видов. В данном случае таким источником является *Viridiplantae*. Для поиска использовались параметры, позволяющие искать идентичные или почти идентичные (с малым фиксированным числом несовпадений) фрагменты. Это значительно сократило число выделяемых совпадений. Получаемые при таком условии совпадения имеют достаточную длину для того, чтобы можно было говорить о наличии транспозонов в анализируемой последовательности. Заметим, что программа не только показывает список найденных транспозонов, но и позволяет увидеть их локализацию в геноме хлоропласта (рис. 1).



Рис.1. Локализация транспозонов в геноме хлоропластов на примере *Acidosasa purpurea*. Горизонтальные полосы представляют собой саму последовательность, вертикальные — транспозоны.

Остановимся подробнее на вопросе о том, какую именно частоту представленности того или иного элемента генома считать повышенной. Анализ геномов хлоропластов направлен на поиск и выявление сравнительно коротких (до 700 п.н.) подпоследовательностей, претендующих на роль транспозонов. Одной из отличительных черт транспозонов является их повышенная частотность по сравнению с иными подпоследовательностями близкой длины.

Говоря о повышенной (сверхпредставленность) либо пониженной (недопредставленность) того или иного элемента генома, всегда следует указывать ту частоту, с которой будет сравниваться наблюдаемая частота появления того или иного

элемента генома (транспозона, в частности). Один из возможных подходов основан на сравнении реальной частоты подпоследовательности длиной q символов с той частотой, которую можно ожидать по частотам подпоследовательностей длины $q - 1$ [8 – 10]. Исследуемая подпоследовательность «разбивается» на две пересекающиеся части, каждая длиной $q - 1$ с общей «центральной» подпоследовательностью длиной $q - 2$ и тогда ожидаемая частота есть произведение частот двух пересекающихся подпоследовательностей, делённая на частоту «центральной» части. Отношение реальной частоты подпоследовательности к её ожидаемой частоте называется информационной ценностью данной подпоследовательности.

Описанный выше подход формально применим к подпоследовательностям любой длины, однако содержательно он годится для изучения сравнительно коротких фрагментов нуклеотидных последовательностей. Другой подход состоит в том, чтобы сравнивать частоты появления транспозонов не как таковых, а как последовательностей, порождающих Марковский процесс того или иного порядка (именно на таком сравнении построена работа фактически всех алгоритмов поиска кодирующих и не кодирующих областей в геномах). В рамках настоящей работы мы придерживались скорее первого подхода, однако в силу большой длины транспозонов повышенной частотой считали появление его в двух и более копиях.

Результаты

Результаты поиска транспозонов в указанных геномах хлоропластов покрытосеменных приведены в таблице 1. Заметим, что выдача программы Sensor весьма велика и превышает указанную таблицу; однако в большинстве случаев транспозоны, принадлежащие хлоропластам растений одного семейства, имеют практически одинаковые характеристики и поэтому транспозоны и их характеристики приведены в сводной таблице, где для каждого семейства изученных растений представлены общие характеристики. В случае, если внутри одного семейства встречалось несколько транспозонов, в таблице указаны средние значения. В геномах голосеменных встречается только один транспозон, характеристики которого у разных видов совпадают.

Таблица 1. Транспозоны разных семейств отдела покрытосеменных и их некоторые характеристики:

Семейство	TE	N	S
<i>Aceraceae</i>	MuDR-64_OS	610	329*
	Copia-18_BD-I	313	381*
<i>Caprifoliaceae</i>	MuDR-64_OS	613	342
	Copia-18_BD-I	313	272
<i>Malvaceae</i>	Copia-18_BD-I	313	272
<i>Morinaceae</i>	MuDR-64_OS	613	322
	Copia-18_BD-I	313	272
<i>Oleaceae</i>	MuDR-64_OS	613	345
	Copia-18_BD-I	313	269
<i>Asteraceae</i>	MuDR-64_OS	611	344
	Copia-18_BD-I	313	272
<i>Berberidaceae</i>	MuDR-64_OS	606	394
	Copia-18_BD-I	313	275

<i>Fabaceae</i>	MuDR-64_OS	767	300
	Copia-18_BD-I	313	275
<i>Poaceae</i>	MuDR-64_OS	609	577
	Copia-18_BD-I	315	310
	Copia-33_BD-I	1341	595
	Helitron-N17B_OS	300	229
<i>Ranunculaceae</i>	MuDR-64_OS	608*	335*
	Copia-18_BD-I	313	275
<i>Nyctaginaceae</i>	Copia-18_BD-I	313	263
<i>Solanaceae</i>	MuDR-64_OS	612	340
	Copia-18_BD-I	313	270*
<i>Chrysobalanaceae</i>	MuDR-64_OS	601	289
	Copia-18_BD-I	313	272

Транспозоны содержатся в 89 геномах и отсутствуют в 11. В отделе покрытосеменных транспозоны выявлены в 53 геномах и представлены следующими видами: MuDR-64_OS, Copia-18_BD-I, Copia-33_BD-I, Helitron-N17B_OS. Транспозоны Copia-33_BD-I и Helitron-N17B_OS присутствуют только у Злаков, а в остальных семействах есть только MuDR-64_OS и Copia-18_BD-I. Транспозоны отсутствуют в геномах хлоропластов *Acer yangbiense* isolate Malutang-1-2009, *Achyranthes aspera*, *A. bidentata*, *A. longifolia*. В геномах хлоропластов видов из отдела голосеменных транспозоны есть в 36 геномах и представлены только одним транспозоном Copia-18_BD-I. Среди исследованных голосеменных отсутствуют транспозоны у *Cupressus chengiana*, *C. gigantea* voucher Cglanxian-2015, *C. jiangensis*, *Thuja koraiensis*, *T. occidentalis*, *T. plicata*, *T. Sutchuenensis*.

В геномах хлоропластов покрытосеменных растений количество копий транспозонов в большинстве случаев равно двум и встречаются в геноме в двух направлениях (как в основной цепи ДНК, так и во вспомогательной). Исключение составляют виды семейств Жимолостные, Мориновые, Бобовые и Злаковые. В геномах хлоропластов голосеменных растений транспозоны встречаются в одной копии и имеют только одно направление.

Таблица 2.

TE	N
Copia-18_BD-I	53
MuDR-64_OS	51
Copia-33_BD-I	1
Helitron-N17B_OS	1
Голосеменные	
Copia-18_BD-I	36

Рассмотрим теперь распределение транспозонов по геномам безотносительно к наблюдаемому числу из копий в том или ином геноме; речь идёт о том, что разные транспозоны встречаются в разном числе геномов, и эта разница может быть весьма существенной.

В таблице 2 показано разнообразие видов транспозонов и их количество в определенных семействах. Однако нужно учитывать, что в некоторых геномах хлоропластов транспозоны имеют копии, вместе с которыми количество транспозонов достигает до 200. Для голосеменной картина распределения выглядит существенно проще: единственный обнаруженный для них транспозон Copia-18_BD-I встречается в 36 геномах хлоропластов.

Обсуждение и выводы

Распределение транспозонов по отделам растений неравномерно. Большое разнообразие видов транспозонов наблюдается в семействах покрытосеменных растений, что соответствует огромному разнообразию видов растений в данном отделе. Отсутствие транспозонов наблюдается у *Acer yangbiense isolate Malutang-1-2009* скорее всего из-за изолированности вида на определенной территории и тем, что вид имеет древнее происхождение, является редким и находится на грани исчезновения. Отсутствие транспозонов у семейств Амарантовых и Кипарисовых скорее всего объясняется эволюционными изменениями, однако подтверждение этой гипотезы требует дальнейших исследований как их филогении, так и распространённости других транспозонов в геномах хлоропластов.

Приведённые здесь результаты показывают, что часто встречающееся утверждение о полном отсутствии транспозонов в геномах хлоропластов не является верным. Вместе с тем, нельзя не отметить, что и уровень распространённости транспозонов в геномах хлоропластов, и их разнообразие весьма отличаются от аналогичных показателей, наблюдаемых для других генетических систем. Эти отличия, а также их эволюционный смысл требуют дополнительных исследований.

Список литературы

1. Bennetzen J. L., Wang H. The contributions of transposable elements to the structure, function, and evolution of plant genomes //Annual review of plant biology. – 2014. – Т. 65. – С. 505-530.
2. Kejnovsky E., Hawkins J. S., Feschotte C. Plant transposable elements: biology and evolution //Plant Genome Diversity Volume 1. – Springer, Vienna, 2012. – С. 17-34.
3. McClintock B. Controlling elements and the gene //Cold Spring Harbor symposia on quantitative biology. – Cold Spring Harbor Laboratory Press, 1956. – Т. 21. – С. 197-216.
4. Barkan A. Transposon-induced nuclear mutations that alter chloroplast gene expression. Annual report, September 1, 1992--April 15, 1993. – Oregon Univ., Eugene, OR (United States). Inst. of Molecular Biology, 1993. – №. DOE/ER/20054-2.
5. Zhou, D. X., Massenet, O., Quigley, F., Marion, M. J., Moneger, F., Huber, P., & Mache, R. (1988). Characterization of a large inversion in the spinach chloroplast genome relative to *Marchantia*: a possible transposon-mediated origin. *Current Genetics*, 13(5), 433–439.
6. Bennetzen J. L. Transposable element contributions to plant gene and genome evolution //Plant molecular biology. – 2000. – Т. 42. – №. 1. – С. 251-269.
7. Wicker, T., Gundlach, H., Spannagl, M., Uauy, C., Borrill, P., Ramírez-González, R.H., De Oliveira, R., Mayer, K.F., Paux, E. and Choulet, F., 2018. Impact of transposable elements on genome structure and evolution in bread wheat. *Genome biology*, 19(1), pp.1-18.
8. Sadovsky, M.G. Information capacity of nucleotide sequences and Its applications. *Bull. Math. Biol.* 68, 785–806 (2006).
9. Sadovsky, M.G. Comparison of Real Frequencies of Strings vs. the Expected Ones Reveals the Information Capacity of Macromolecules. *Journal of Biological Physics* 29, 23–38 (2003).
10. Бугаенко Н.Н., Горбань А.Н., Садовский М.Г., 1997. Информационная емкость нуклеотидных последовательностей и их фрагментов // *Биофизика*. Т. 42. Вып. 5. С. 1047-1053.
11. Kozo-Polianskiĭ ВМ. *Symbiogenesis: a new principle of evolution*. Harvard University Press; 2010.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ НАЛОГОВЫХ ПОСТУПЛЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

А.Л.Осипов, В.П.Трушина

Новосибирский государственный университет экономики и управления,
alosip@mail.ru

В статье анализируется влияние различных макроэкономических показателей на планирование налоговых поступлений в РФ. Разработаны нелинейные модели, которые исследованы с помощью эконометрических методов на выборке поступления налогов в РФ в период с 2009 по 2018 годов. Разработаны информационные технологии, инструментальные средства и многофакторные модели по предсказанию налоговых поступлений. Проведены вычислительные эксперименты, показывающие высокую эффективность предложенных зависимостей с использованием информационных технологий.

В период широкого развития и распространения информационно-коммуникационных технологий огромное значение представляют информационные системы передачи, хранения и обработки экспериментальных данных в социально-экономической деятельности.

Актуальной задачей в мировой практике представляет собой проблема собирания налогов и тщательного их анализа с целью выработки эффективных механизмов их прогнозирования.

Выявление взаимосвязи между всевозможными налоговыми поступлениями и макроэкономическими показателями, влияющими на их собираемость, разумно применять регрессионные методики и в сочетании с ними нелинейные зависимости типа Кобба-Дугласа.

Механизмы влияния макроэкономических показателей на сбор налогов позволяют более качественно и надежно контролировать этот процесс. При изучении зависимостей между макроэкономическими параметрами и налоговыми поступлениями требуется применять многофакторные нелинейные математические модели в сочетании с информационными системами с базами данных и инструментальными средствами предсказания налоговых поступлений. Нелинейные модели типа Кобба-Дугласа достаточно хорошо зарекомендовали себя при прогнозировании количества пожаров, а также при предсказании доходов гостиниц и ресторанов [1].

Выявление влияния зависимости макроэкономических факторов на целевой фактор дает возможность разрешить проблему научного исследования возможность предвидеть, а также прогнозировать состояние процесса при изменении макроэкономических факторов.

В качестве научных исследований используются методы: корреляционного, регрессионного и факторного анализов, теории принятия решений; программирования; моделирования и прогнозирования. В качестве моделей рассматривались различные варианты производственных функций, которые позволяют описывать и прогнозировать экономику страны с более надежными статистическими параметрами [2-4].

Далее исследовались следующие многофакторные модели вида $Y_t = A X_1^\alpha X_2^\beta X_3^\gamma X_4^\tau e^{\lambda t}$, где Y_t - вид налога в t -ом году, X_1, X_2, X_3, X_4 - макроэкономические факторы, влияющие на налог в t -ом году, λ - коэффициент, характеризующий экспоненциальный временной тренд. Для расчета налоговых поступлений разработана база данных и компьютерное приложение на языке программирования Python для расчета налоговых поступлений.

Для переключения между налогами и функциональными блоками реализовано следующее меню, представленное на рисунке 1.

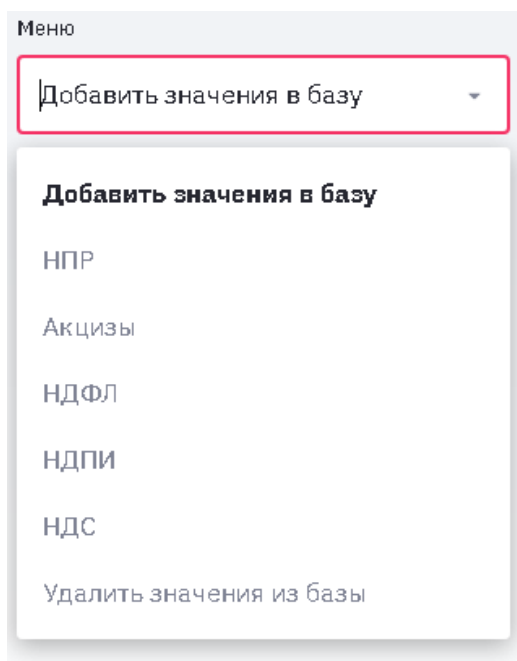


Рис.1. Выбор вида налоговых поступлений

Основная страница прогнозирования налоговых поступлений выглядит следующим образом, представленном на рисунке 2.

Меню

НПР

Прогнозирование налоговых поступлений

Налог на прибыль

	years	post_npr	ind_fiz_ob_VVP	ind_def_VVP	ind_port_cen	brent	doll
0	2009	1264	92.1800	101.9900	108.8000	64.1800	30.2
1	2010	1774	104.5000	114.1900	108.7800	80.3200	28.9
2	2011	2270	104.2600	115.9100	106.1000	112.4100	27.2
3	2012	2355	103.6600	109.0900	106.5700	110.7000	28.9
4	2013	2072	101.7900	105.4100	106.4700	108.6900	29.9
5	2014	2373	100.7400	107.5000	111.3500	97.6400	32.6
6	2015	2599	97.6900	107.5900	112.9100	53.4100	49.1
7	2016	2270	100.3300	103.1700	105.3900	46.1000	60.2
8	2017	3290	101.6300	105.3600	102.5100	55.5500	55.8
9	2018	4100	102.2500	110.3000	104.2600	71.3800	55.6

☐ Корреляционная матрица

Рис.2. Форма для прогнозирования

На рисунке 3 представлен результат прогнозирования показателя налога на добавленную стоимость по значимым макроэкономическим показателям, которые рассчитываются на основе корреляционного анализа.

Разработанное приложение дает возможность анализировать данные, которые хранятся в базе данных, проводить корреляционный анализ и на его основе быстро строить модели степенной регрессии, с учетом различных вариаций факторов, для прогнозирования налоговых поступлений в Федеральный бюджет.

☒ Расчет по заданным параметрам:

ared_zp	39167,00	-	+
mrot	7800,00	-	+
zadol_proaroch	2487,00	-	+
vvp	92181,38	-	+
vgr	74926,80	-	+
chisl_zan	72354,42	-	+

[Вывести значение](#)

Расчетный целевой показатель: 3171.3250500545228

Рис.3. Результат прогнозирования

Расчетный целевой показатель равен 3171 млрд рублей. Фактические поступления составили 3251 млрд рублей. Относительная ошибка составила 2,46%.

Система позволяет строить графические зависимости между истинными показателями налога и их прогнозируемыми значениями. На рисунке 4 представлен график налога на добавленную стоимость и его прогнозируемым поступлением.

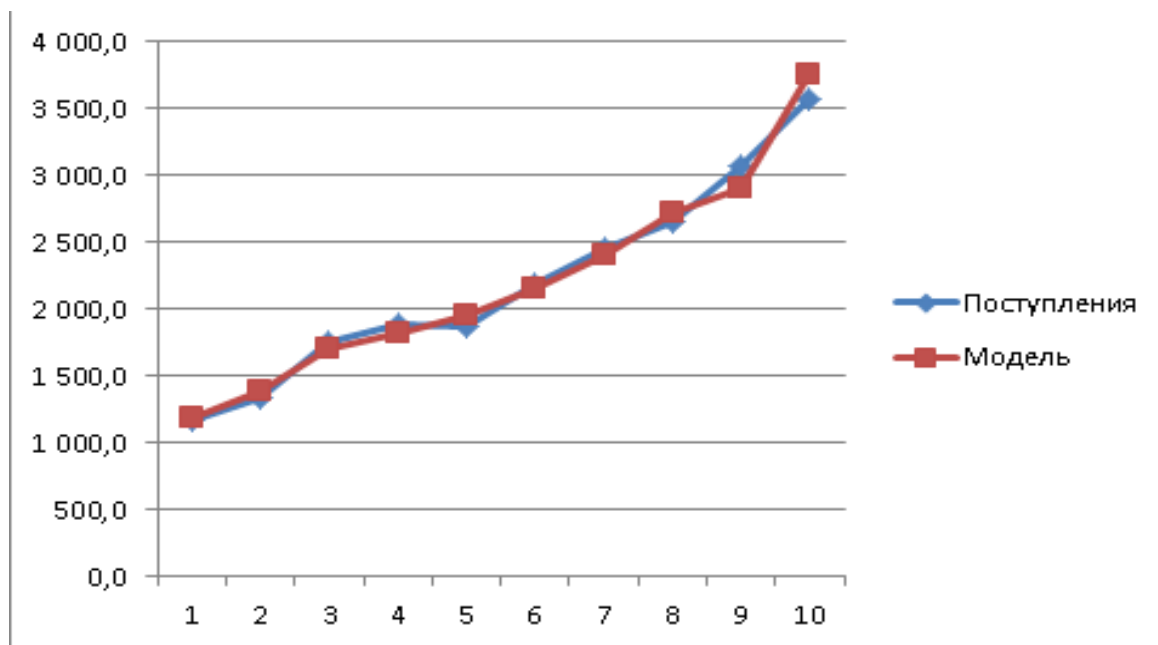


Рис. 4. График фактических и прогнозируемых поступлений

С помощью инструментальных средств были построены значимые многофакторные нелинейные модели, представленные в табл. 1 и в табл. 2, в зависимости от используемых факторов.

Таблица 1

Характеристики моделей для прогноза налога на прибыль

Модель	R^2	F	SD
$Hnp = 1481,565 \text{ ИПЦ}^{-0,37169} \text{ Нефть}^{0,4} \text{ НДПИ}^{0,255949}$	0,88	15,16	0,133
$Hnp = 0,002781 \text{ ИПЦ}^{0,562808} \text{ Нефть}^{1,17713} \text{ Курс\$}^{1,623744}$	0,9	18,12	0,123
$Hnp = 0,001639 \text{ ИПЦ}^{0,604325} \text{ Нефть}^{1,208456} \text{ Курс\$}^{1,684657} e^{-0,00413 t}$	0,9	11,33	0,135
$Hnp = 6356,229 \text{ ИПЦ}^{-0,64763} \text{ Нефть}^{0,330694} e^{0,107374 t}$	0,88	14,93	0,134
$Hnp = 1611646 \text{ ИПЦ}^{-1,12445} \text{ Курс\$}^{-0,56911} e^{0,143109 t}$	0,87	12,94	0,143
$Hnp = 338222 \text{ ИПЦ}^{-1,16909} e^{0,088647 t}$	0,79	13,2	0,165
$Hnp = 291,7092 \text{ Нефть}^{0,33942} e^{0,110229 t}$	0,88	25,4	0,126
$Hnp = 8275,928 \text{ Курс\$}^{-0,57186} e^{0,14756 t}$	0,86	20,95	0,137
$Hnp = 2379,684 \text{ ИПЦ}^{-0,4615} \text{ Нефть}^{0,376536} \text{ НДПИ}^{0,166119} e^{0,03788 t}$	0,88	9,54	0,146
$Hnp = 1037272,42 \text{ ИПЦ}^{-1,4647} \text{ НДПИ}^{-0,431379} e^{0,27586 t}$	0,82	8,96	0,167
$Hnp = 1101,659 \text{ НДПИ}^{-0,382153} e^{0,259827 t}$	0,8	14,195	0,161

В перечисленных моделях использовались следующие факторы: индекс потребительских цен (ИПЦ); цены на нефть марки Brent; курс доллара и НДПИ (налог на добычу полезных ископаемых). Для вышеперечисленных моделей были посчитаны следующие важные показатели, представленные в табл. 2.

Таблица 2

Прогнозные характеристики моделей

MAPE	MAE	MSE	RMSE	Средняя ошибка аппроксимац ии	WAPE	Точность прогноза
9,817	224,85	57251,8	239,27	9,8	9,23	90,77
8,373	198,664	54856,02	234,21	8,37	8,15	91,85
8,324	197,564	55040,5	234,61	8	8,11	91,89
9,711	229,542	63753,7	252,49	9,7	9,42	90,58
10,255	240,681	73248,1	270,64	10	9,88	90,12

11,528	262,794	111153,5	333,4	11,5	10,78	89,22
9,929	201,519	67471,5	259,8	9,9	8,27	91,73
10,672	255,228	81418,9	285,3	10,7	10,47	89,53
9,777	226,416	58717,7	242,2	9,8	9,29	90,71
10,184	244,443	116684	341,6	10,2	10,03	89,97
11,441	279,777	125370,6	354,1	11,4	11,48	88,52

Важный показатель WAPE (взвешенная абсолютная процентная ошибка) измеряется в процентах. Через этот показатель вычислена точность прогнозирования в процентах, как 100-WAPE.

В заключении следует отметить, что разработанная методика позволяет учитывать при прогнозировании налоговых поступлений значимые макроэкономические показатели, что позволяет не только повысить достоверность расчетной оценки, но и выявить причины, влияющие на уровень рассчитанных налоговых поступлений. Проведено исследование и апробация многофакторных нелинейных моделей типа Кобба-Дугласа, которые продемонстрировали высокую значимость используемых факторов на собираемость налогов. На реальном экспериментальном материале продемонстрирована высокая эффективность разработанных методик. Созданы программные средства для выявления нелинейных зависимостей налоговых поступлений от значимых макроэкономических факторов.

Список литературы

1. Пранов Б.М. Адекватные междисциплинарные модели в прогнозировании временных рядов статистических данных / Б.М. Пранов // Программные продукты и системы. – Том 31. - № 3. – 2018. – С. 444-447.
2. Кирилук И.Л. Модели производственных функций для российской экономики / И.Л. Кирилук // Компьютерные исследования и моделирование. - 2013. - Т. 5. - № 2. - С. 293-312.
3. Осипов А.Л. Влияние макроэкономических показателей на налог на прибыль: факторные модели и инструментальные методы / А.Л. Осипов, В.П. Трушина, Ф.Л. Осипов // Наука Красноярья. - 2019. - Том 8. - № 5-3. - С. 111-115.
4. Осипов А.Л. Макроэкономические показатели и их влияние на налог на добавленную стоимость: факторные модели и инструментальные средства / А.Л. Осипов, В.П. Трушина, Ф.Л. Осипов // Наука Красноярья. - 2020. - Том 9. - № 3-2. - С. 108-113.

THEORY OF SWITCHABLE ION TRANSPORT IN MEMBRANES WITH ELECTRICALLY CONDUCTIVE SURFACE¹

I.I. Ryzhkov^{1,2}, S.V. Kozlova¹, I.V. Stepanova^{1,2}, D.V. Guzei²

¹Institute of Computational Modelling SB RAS, Krasnoyarsk, Russia,

²Siberian Federal University, Krasnoyarsk, Russia

E-mail: rii@icm.krasn.ru

Introduction

Over the last two decades, a lot of research has been focused on the development of nanochannel systems and nanoporous membranes, which can change their transport properties in ionic solutions in response to the applied electric field [1]. When the channel dimension becomes comparable with the Debye length, the overlap of electric double layers leads to the accumulation of counter-ions and exclusion of co-ions [2]. In this case, the direct manipulation of ion transport through the nanochannel can be performed by applying a transmembrane potential difference and/or varying the surface charge. If membrane material is electrically conductive, then the surface charge can be altered by applying a prescribed potential to the membrane, i.e. by injecting or withdrawing electrons to or from the membrane surface. It provides a powerful tool for changing and adjusting such membrane characteristics as ionic selectivity, ionic conductivity, and ion rejection (in filtration applications).

In this work, we develop the theory of ion transport in membranes with electrically conductive surface. The Space charge (SC) and Uniform potential (UP) models are generalized to the case of constant surface potential in the presence of chemical charge.

Theoretical model

A membrane is modelled as an array of cylindrical pores of length L_p and radius R_p , which separate two reservoirs denoted by L and R (Fig. 1 (a)). Thus, it is enough to consider a single pore. The reservoirs are kept at pressures P_L and P_R and electrical potentials Φ_L and Φ_R , respectively. They contain aqueous solutions of the same monovalent and symmetric (1:1) electrolyte with concentrations C_L and C_R , respectively. The membrane surface is electrically conductive and has the potential Φ_e . We are interested in the case, where the ion transport is generated by the concentration difference between reservoirs ($C_L > C_R$) in the absence of pressure difference ($P_L = P_R = 0$). The potential difference $\Delta\Phi = \Phi_L - \Phi_R$ between reservoirs results from the Donnan potential jumps at the membrane/solution interfaces and the diffusion potential induced by the difference of ion diffusion coefficients. The positive (negative) sign of membrane potential corresponds to the cation (anion) selectivity provided that the diffusion potential is negligibly small.

The Gouy-Chapman-Stern model [3, 4] is used for describing the electric double layer (EDL) in the nanopore. The scheme of EDL model is shown in Fig. 1 (b). The charge at the conductive pore wall is formed by electrons, which can be injected or withdrawn with the help of external power source. The potential Φ_e of the pore wall is constant. On the contrary, the electronic charge density Σ_e is not constant, but varies along the pore to compensate the non-uniform potential distribution in the pore interior and ensure that the pore wall is an equipotential surface [5].

¹ This work is supported the Russian Foundation for Basic Research, Project 18-38-20046.

The solution side of the EDL is divided into the diffuse layer and the Stern layer, which in turn consists of two parts. The inner part of thickness δ_i and relative permittivity ε_i contains the water molecules oriented by the near-wall electric field. It is bounded by the inner Helmholtz plane

(iHp), where the partially desolvated and specifically adsorbed ions as well as ionic charges arising from chemically reactive surface groups are located. The chemical charge density and electrical potential at the iHp are denoted by Σ_c and Φ_c , respectively. The outer part of the Stern layer with the thickness δ_o and relative permittivity ε_o is bounded by the outer Helmholtz plane (oHp) also known as the surface of closest approach for ions in solution. The charge density and electrical potential at the oHp, which is the boundary between the Stern and diffuse layers, are given by Σ_d and Φ_d , respectively. Due to the orientation of water

molecules in these layers, their relative permittivities typically obey the relation $\varepsilon_i < \varepsilon_o < \varepsilon$, where ε is the relative permittivity of the diffuse layer [3]. This layer extends from the oHp to the pore axis, where it can overlap with the diffuse layer from the opposite wall if the pore radius is comparable with or smaller than the Debye length.

When the pore radius is larger than the Debye length, the variations of potential, ion concentrations, and pressure in radial direction of the pore should be taken into account. In this case, the two-dimensional Space-charge (SC) model should be used for describing the diffuse layer. This model is derived from the Navier-Stokes, Nernst-Planck, and Poisson equations.

The transport of electrolyte in the diffuse layer of the nanopore is characterized by the solution velocities U and V in radial and axial directions, respectively, pressure P , cation C_+ and anion C_- concentrations (mol/m³), and electrical potential Φ , which are functions of axial and radial coordinates. The ions in the nanopore are transported by convection, diffusion, and migration in electric field. The axial fluxes of ions are written as

$$J_{\pm} = C_{\pm}U - D_{\pm} \frac{dC_{\pm}}{dz} \mp C_{\pm} \frac{D_{\pm}F}{R_g T} \frac{d\Phi}{dz},$$

where $D_{\pm}$ are the ion diffusion coefficients, R_g is the ideal gas constant, T is the temperature, and F is the Faraday constant. In what follows, we will need the quantities averaged over the

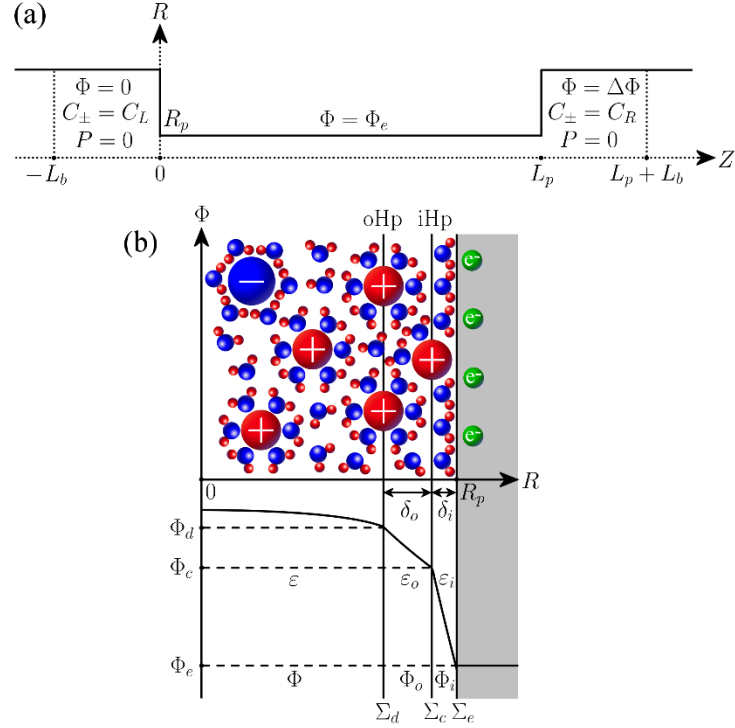


Fig. 1. A cylindrical nanopore connecting two reservoirs (a). The electric double layer model in the nanopore (b).

part of pore cross-section, which contains the diffuse layer. The average axial velocity is defined by

$$\bar{V} = \frac{2}{R_p'^2} \int_0^{R_p'} V R dR.$$

where $R_p' = R_p - \delta_i - \delta_o$. The average pressure $\bar{P}$, ion concentrations $\bar{C}_\pm$, potential $\bar{\Phi}$, axial ion fluxes $\bar{J}_\pm$, total axial ion flux $\bar{J} = \bar{J}_+ + \bar{J}_-$, and axial charge flux $\bar{I} = \bar{J}_+ - \bar{J}_-$ are introduced in the same way.

When the nanopore radius is comparable with or less than the Debye length, the profiles of potential, ion concentrations, and pressure in the radial direction become almost uniform. In this

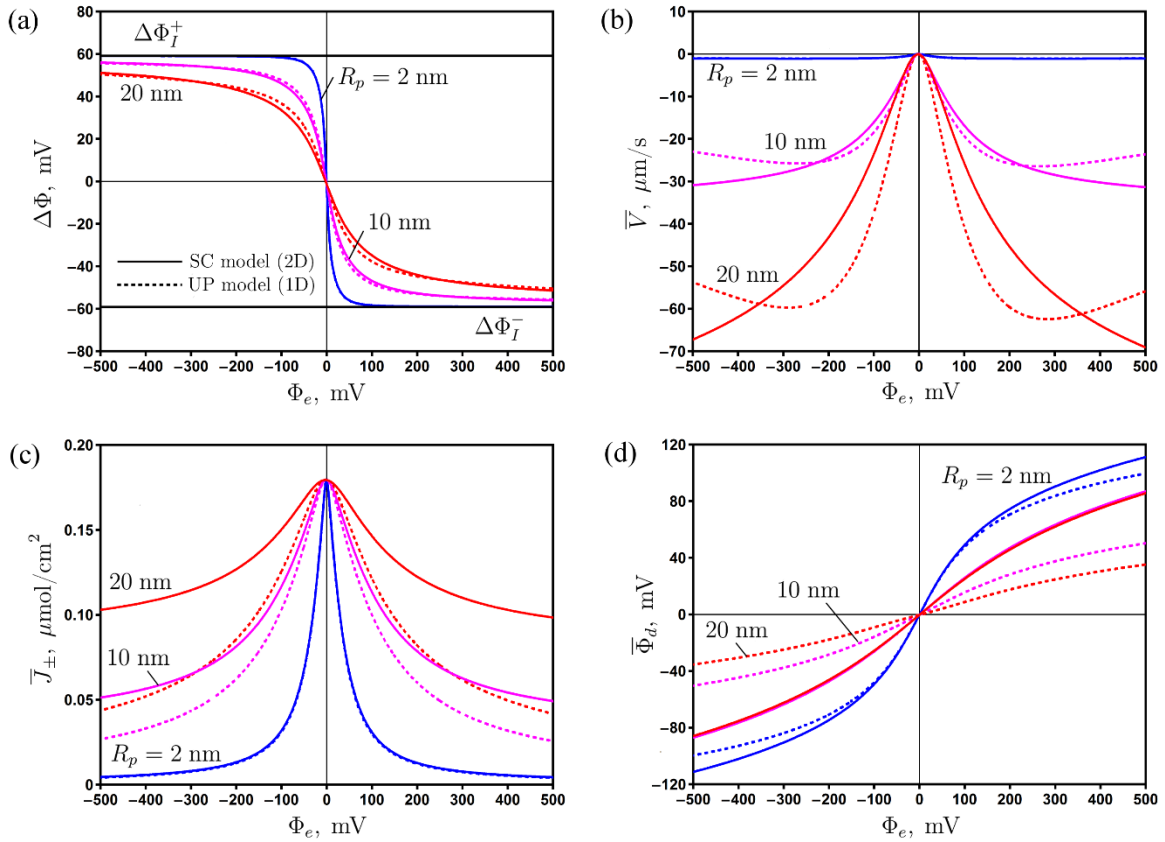


Fig. 2. The membrane potential (a), average axial velocity (b), average ion fluxes (c), and average diffuse layer (oHp) potential (d) vs. the applied surface potential for different pore radii in KCl aqueous solution. $C_L = 10$ mM, $C_R = 1$ mM. $\varepsilon_i = 2$, $\varepsilon_o = 2$.

case, one can neglect the radial dependence of all quantities and employ the one-dimensional Uniform potential (UP) model for describing the diffuse layer [6]. The governing equations reduce to the system of ordinary differential equations, which should be solved with the appropriate boundary conditions, see [7] for the details.

Physical parameters

In this work, the theoretical calculations are performed for potassium chloride aqueous solution. The diffusion coefficients of sodium and chloride ions are $D_+ = 1.957 \cdot 10^{-9}$ m²/s

and $D_- = 2.032 \cdot 10^{-9}$ m²/s. The temperature is fixed at $L_p = 298.15$ K, and solution viscosity $\mu = 0.89 \cdot 10^{-3}$ Pa s. The pore length is chosen as $L_p = 10$ μ m, which corresponds (by the order-of-magnitude) to a typical thickness of conductive free-standing membranes described in [7,8]. The Stern layer characteristics are based on the recent experimental study using the X-ray photoelectron spectroscopy [10]. The thickness of the inner part is taken as $\delta_i = 0.2$ nm (a single layer of water molecules) and the thickness of the outer part is set to $\delta_o = 0.4$ nm (half of the hydrated ion diameter). The relative permittivity of the diffuse layer $\varepsilon = 78.5$ corresponds to water, while the Stern layer permittivities are taken as $\varepsilon_i = 2$, $\varepsilon_o = 10$.

Results and discussion

The dependence of membrane potential on the applied surface potential is shown in Fig. 2 (a). When $\Phi_e > 0$, the surface is positively charged, and the membrane potential $\Delta\Phi < 0$, which corresponds to the anion selective membrane. In the case $\Phi_e < 0$, the surface charge is negative and the membrane potential $\Delta\Phi > 0$, so the membrane is cation selective. The variation of surface potential from +500 mV to -500 mV leads the continuous change of membrane potential from the value $\Delta\Phi_I^-$ corresponding to ideal anion selectivity to the value $\Delta\Phi_I^+$ corresponding to ideal cation selectivity:

$$\Delta\Phi_I^\pm = \pm \frac{R_g T}{F} \ln \frac{C_L}{C_R}.$$

The influence of pore radius on the membrane potential is demonstrated in Fig. 2 (a). The pore radius of 2 nm is smaller than the Debye length for considered concentration range (3.04 nm for 10 mM solution and 9.61 nm for 1 mM solution). In this case, the overlap of diffuse layers leads to a steep switching between cation and anion selectivity in a narrow range of applied potentials near zero. The values of membrane potential for applied voltages above +100 mV and below -100 mV coincide with the potential differences $\Delta\Phi_I^-$ and $\Delta\Phi_I^+$ corresponding to ideal anion and ideal cation selective membranes, respectively. The increase of pore radius diminishes the diffuse layers overlap and results in a smooth transition between anion and cation selective states. It also leads to larger deviation of membrane potential from the ideal selectivity values at high applied voltages. For small pore radius of 2 nm, the UP and SC models provide the same results, but the deviation between the models becomes noticeable with increasing the pore radius. In particular, the UP model overestimates the membrane potential magnitude in the range approximately from -250 mV to +250 mV, while outside this range a slight underestimation is observed in comparison with the SC model (the exact range boundaries depend on the pore radius, voltage sign, ion diffusion coefficients, etc.). Note that the UP model approximates the radial variation of potential by a constant value, and the 'quality' of this approximation depends on the pore radius, applied voltage, ion concentration, and other parameters.

The cross-sectionally averaged axial velocity (or solvent flux) and ion fluxes are shown in 2 (b) and (c), respectively. The ion fluxes are positive, since there is a diffusion of ions from the reservoir L with a higher salt concentration into the reservoir R with a lower salt concentration. At the same time, the velocity of the solution is negative, which corresponds to the osmotic transfer of water in the opposite direction. This transfer occurs under the influence of the pressure gradient caused by the different osmotic pressure jumps at the pore entrance and exit (osmosis) as well as under the influence of an electric field on the uncompensated charge inside the pore (electroosmosis). When a membrane is not selective (the surface

potential is near zero), the ion fluxes reach the maximum value, and the solution flow vanishes. The increase of applied potential magnitude introduces ionic selectivity, which, in turn, leads to the increase of (electro) osmotic flow and decrease of ion fluxes due to co-ion exclusion inside the pore. The velocity magnitude increases monotonically with the increase of applied potential in the SC model, while the UP demonstrates non-monotonous behaviour at large pore radii due to inadequate approximation of radial potential profile by a constant value. The UP model underestimates the ion fluxes and overestimates the velocity magnitude in comparison with the SC model (except the range of high applied potentials, where the opposite effect for velocity is observed). With increasing the pore radius, the osmotic velocity becomes larger and ion fluxes also increase (due to less co-ion exclusion). Note that their dependencies on the applied potential are slightly asymmetric with respect to the line $\Phi_e = 0$ due to different ion diffusion coefficients of KCl electrolyte. The average diffuse layer potential is presented in Fig. 2 (d). It shows the decrease in magnitude with increasing the pore radius. When the pore radius is larger than the Debye length, the compensation of surface charge by the counter-ion charge in the diffuse layer is more complete, and the diffuse layer potential is smaller. The sign and magnitude of Φ_d correlate with those of applied surface potential Φ_e . The UP model underestimates the diffuse layer potential in comparison with the SC model.

Summary

We have developed the theory of ion transport in membranes with conductive surface. A comparison between the 2D SC and 1D UP models reveals a good agreement for membrane potential and ion fluxes even when the pore radius significantly exceeds the Debye length. The underestimation of osmotic velocity, ion fluxes, and iHp/oHp potentials by the UP model is observed. The developed theoretical framework can be employed for prediction of ion transport in conductive membranes with application to nano- and ultrafiltration, (reverse) electrodialysis, electrochemical sensors, and nanofluidic devices.

References

1. Z.S. Siwy, S. Howorka, Engineered voltage-responsive nanopores, *Chem. Soc. Rev.* 39 (2010) 1115–1132.
2. R.B. Schoch, J. Han, P. Renaud. Transport phenomena in nanofluidics. *Rev. Modern Phys.* 80 (2008) 839–883.
3. C.H. Hamann, A. Hamnett, W. Veilstich. *Electrochemistry*. Wiley–VCH, Weinheim, 2007.
4. J. Duval, J. Lyklema, J.M. Kleijh, H.P. van Leeuwen. Amphifunctionally electrified interfaces: coupling of electronic and ionic surface-charging process. *Langmuir*, 2001. V. 17. P. 7573–7581.
5. Ryzhkov I.I., Lebedev D.V., Solodovnichenko V.S., Shiverskiy A.V., Simunin M.M. Induced-charge enhancement of diffusion potential in membranes with polarizable nanopores. *Physical Review Letters*, 2017. V. 119, 226001.
6. Peters B.B., Van Roij R., Bazant M.Z., Biesheuvel P.M. Analysis of electrolyte transport through charged nanopores, *Phys. Rev. E*, 2016. V. 93, 053108.
7. I. Ryzhkov, A.S. Vyatkin, E.V. Mikhlin. Modelling of conductive nanoporous membranes with switchable ionic selectivity. *Membranes and Membrane Technologies*, 2020. V. 2 (1) P. 10–19.
8. M. Nishizawa, V.P. Menon, C.R. Martin, Metal nanotubule membranes with electrochemically switchable ion-transport selectivity, *Science*, 1995. V. 258, p. 268.
9. C.R. Martin, M. Nishizawa, K. Jirage, M. Kang, S.B. Lee. Controlling ion-transport selectivity in gold nanotubule membranes. *Adv. Mater.* 2001, V. 13, 1351.
10. M.A. Brown, Z. Abbas, A. Kleibert, R.G. Green, A. Goel, S. May, T.M. Squires. Determination of surface potential and electrical double-layer structure at the aqueous electrolyte-nanoparticle interface. *Phys. Rev. X* 6 (2016) 011007.

СТРАТИФИКАЦИЯ БОЛЬНЫХ С РАЗНЫМ ТИПОМ ОПУХОЛЕЙ НА ОСНОВАНИИ ДАННЫХ РАЗВЕРНУТОГО АНАЛИЗА КРОВИ

Садовский М.Г.^{1,2}, Феллер А.А.², Мартынова Е.А.², Черняев Д.В.^{2,3},
Семёнов Э.В.^{2,3}, Слепов Е.В.³, Зуков Р.А.^{2,3}

¹ Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск, Россия

² Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В. Ф. Войно-Ясенецкого, Красноярск, Россия

³ Красноярский краевой онкологический диспансер им. А. И. Крыжановского, г. Красноярск, Россия

Введение

Злокачественные новообразования являются второй причиной смертности в мире. На сегодняшний день используется множество различных лабораторных и инструментальных методов для поиска причин формирования опухоли, её ранней диагностики и лечения [1 – 3]. Все они варьируются от дорогостоящих и высокотехнологичных молекулярно-генетических методов до повседневно используемых простых лабораторных анализов. Как известно, любая клетка человеческого организма может стать раковой (малигнизироваться), именно поэтому существует огромное количество нозологических форм, видов и типов рака, лишь часть из которых может быть обнаружена на ранних стадиях формирования опухоли. Типичный пример вышеописанной проблемы — это рак молочной железы (РМЖ), который бывает наследственным, связанный с “поломкой” гена *brca-1* и один из вариантов приобретённого с наиболее неблагоприятным прогнозом (тройной негативный). В частности, для постановки диагноза *brca-1* ассоциированного РМЖ необходимо провести молекулярно-генетический анализ крови пациентки, тогда как для диагностики тройного негативного РМЖ необходимо удалить опухоль и исследовать её с помощью иммуногистохимического анализа [5 – 7].

Таким образом, разработка и внедрение новых методов для выявления и эффективного лечения злокачественных новообразований является передовой задачей в онкологии. На сегодняшний день существуют множество баз данных по раковым больным, которые широко доступны для практикующих врачей и научных работников, что позволяет искать закономерности развития болезни у однотипных пациентов [8]. Проблема заключается в том, что ввиду массивности и разрозненности данных не всегда удаётся выделить ключевые особенности образования опухоли.

Центральной идеей в методе “упругих карт”, который мы использовали в данном исследовании, является поиск каких-либо неоднородностей в точках, отражающие данные, в многомерном пространстве, а также обнаружение связей между переменными или их комбинациями, а не проверка «сформулированных гипотез», как это делается при стандартном статистическом анализе. Конечно, следует искать наиболее информативные или значимые переменные, или их комбинации, дающие упомянутые выше неоднородности. Идея заключается в следующем: во-первых, исследователь выявляет неоднородности в распределении точек данных и проверяет, различимы ли эти кластеры. На втором этапе исследуется взаимодействие между составом этих кластеров и характеристиками заболевания (или пациента). Такой подход очень удобен для исследования обширных баз данных, содержащих истории болезни, собранные в больницах или других медицинских учреждениях.

Вышеописанный подход может быть применен в исследовании любых электронных данных о пациентах, например, для выявления отличительных особенностей в результатах лабораторных анализов больных, что поможет найти простые предикторы формирования рака. В нашей НИР мы проанализировали базу

данных, содержащую результаты развернутого анализа крови пациентов, наблюдающихся в Красноярском краевом онкологическом диспансере им. А.И. Крыжановского. Из исследования были исключены пациенты с опухолями кроветворной системы. Хотим подчеркнуть, что развернутый анализ крови является обязательным лабораторным исследованием для всех больных, в том числе онкологических, его стоимость, доступность и простота выполнения, наряду с обширностью применения делают этот анализ рутинным, а результаты сопоставимыми по всей стране. Принцип поиска взаимосвязи между результатами анализа крови и онкологической патологией не нова.

На сегодняшний день существует ряд научных работ, посвященных обнаружению взаимосвязи между отклонениями показателей общего анализа крови (ОАК) и клиническими проявлениями рака, оценкой риска прогрессирования опухоли или появлением отдаленных метастазов. Так, в работе [9] показана эффективность оценки общего анализа крови (ОАК) для прогнозирования и коррекции лечения пациентов с раком молочной железы и раком толстой кишки. Результаты общего анализа крови использовались для отслеживания динамики пациентов, пролеченных курсом интраоперационной химиотерапии. Взаимосвязь между результатами общего анализа крови и раком яичников обсуждается в статье [10]. Взаимосвязь между общим анализом крови, биохимическими и иммунологическими данными больных раком молочной железы, представлена в [11]. Авторы полагают, что отсутствие значимого внутригруппового рассеяния может отражать стабильность процессов метаболизма и общую устойчивость пациентов. Дифференциальная диагностика карциноидных опухолей желудочно-кишечного тракта по данным общего анализа крови, обсуждается в [12], где утверждается, что ОАК является эффективным инструментом дифференциальной диагностики некоторых видов рака желудочно-кишечного тракта. Общий анализ крови может быть использован в качестве прогностического маркера вероятности метастазирования в лимфатические узлы при раке эндометрия [13]. Пациенты, прошедшие полный курс лечения от указанного выше заболевания, можно было надежно отнести к группе риска по сравнению с группой с минимальной вероятностью метастазирования. Классификация проведена за счет линейной логистической регрессии; последнее выявило скрытую связь между ростом нейтрофильных клеток и повреждением лимфатических узлов. Точно так же в статье [14] дается оценка вероятности рака эндометрия на основе результатов общего анализа крови. В качестве биомаркеров воспалительного процесса в представленном исследовании использовались характеристики ширины распределения эритроцитов по их объему. Кроме того, эти параметры распределения являются прогностически информативными для пациентов с раком эндометрия. Авторы подчеркивают простоту и низкую стоимость выполнения ОАК. В статье [15] сообщается о возможности проведения общего анализа крови при обследовании рака толстой кишки в целях ранней диагностики. Некоторые данные общего анализа крови указывают на повышенный риск наличия рака толстой кишки, что, в свою очередь, приводит к назначению пациенту дополнительного специального обследования. Подход основан на методах машинного обучения [16]; в этом качестве данная статья в некоторой степени напоминает наш подход и результаты. Корреляционный анализ между дооперационным и послеоперационным содержанием тромбоцитов, связанный с хирургическим вмешательством, у пациентов с раком шейки матки представлен в [13]. В указанной статье утверждается, что некоторые показатели общего анализа крови могут быть использованы в качестве дополнительного инструмента для предоперационной диагностики пациентов с раком шейки матки. Наконец, статьи

[17,18] полностью соответствуют подходу, который мы использовали в нашей НИР. В выше указанных работах представлены исследования простых методов скрининга, включая общий анализ крови, для постановки диагноза миелоидного лейкоза. Он представляет собой простой и легкий в применении метод скрининга миелоидного лейкоза. Было обнаружено, что показатели развернутого анализа крови, а именно абсолютные показатели содержания базофилов, эффективно выявляют хронический миелоидный лейкоз.

Цель работы — выявление взаимодействия структуры, раскрываемой в пространстве и особенностей характеристик болезни. Ключевой вопрос — можно ли использовать результаты развернутого анализа крови для выявления опухолевого процесса. Выяснилось, что между различными показателями развернутого анализа крови существуют корреляционные связи, которые статистически достоверно предсказывают развитие болезни.

Материалы и методы

Нами был проведен программный анализ базы данных, которая содержит лабораторные результаты развернутого анализа крови пациентов с разными нозологическими формами рака. Образцы крови были взяты у пациентов, наблюдающиеся в Красноярском краевом онкологическом диспансере им. А.И. Крыжановского. База данных содержит 867 записей и включает следующие параметры развернутого анализа крови: BAS (абсолютное содержание базофилов в периферической крови), EOS (абсолютное содержание эозинофилов в периферической крови), HCT (показатель гематокрита), HGB (концентрация гемоглобина в цельной крови), IG (содержание иммуноглобулинов в периферической крови), LYM (абсолютное количество лимфоцитов в периферической крови), MCH (среднее содержание гемоглобина на эритроцит), MCHC (уровень насыщения эритроцитов гемоглобином), MCV (средний объем эритроцитов), MON (абсолютное количество моноцитов в периферической крови), MPV (средний объем тромбоцита), NEUT (абсолютное количество нейтрофилов в периферической крови), P-LCR (часть больших тромбоцитов), PCT (процент тромбоцитарной массы в объеме крови), PDW (относительная ширина распределения тромбоцитов по объему), PLT (абсолютное количество тромбоцитов в периферической крови), RBC (абсолютное количество эритроцитов в периферической крови), RDW-CV (изменение относительной ширины распределения тромбоцитов по объему), RDW-SD (стандартное отклонение относительной ширины распределения тромбоцитов по объему), WBC (абсолютное количество лейкоцитов в периферической крови) и скорость оседания эритроцитов (СОЭ).

Предварительная обработка данных включала стандартный статистический анализ, а именно:

- для каждой переменной были определены среднее значение и стандартное отклонение;
- каждая переменная проверена на соответствие нормальности распределения;
- для каждой переменной была разработана гистограмма для оценки модели распределения;

На следующем этапе был реализован анализ главных компонент [19]. МГК был применен для определения эффективного (линейного) измерения данных, а корреляционная матрица была рассчитана для определения пар переменных с высоким линейным ограничением. Последний использовался для выбора переменных из записей РАК, которые необходимо исключить из дальнейшего анализа. Дело в том, что

многочисленные линейные ограничения могут вызвать некоторую предвзятость в раскрытии внутренней структуры. Следующие пары переменных HCT-HGB (0,96), MCH-MCV (0,91), LYM-NEUT 126 (0,96), MPV-PLCR (0,95), MPV-PDW (0,93), PLCR-PDW (0,94), PCT-PLT (0,96), RDWCV-RDWS (0,85) обычно демонстрируют высокие и очень высокие коэффициенты корреляции. Мы применили порог исключения переменной из дальнейшего анализа, равный $\geq 0,85$; следовательно, переменные MCV, NEUT, MPV, PDW, PLCR, PLT, RD-WSD были исключены из дальнейшего анализа. Таким образом, каждый пациент представлен точкой в 21-мерном метрическом пространстве. Везде ниже мы использовали евклидовы метрики для измерения расстояния в пространстве. В таблице 1 показано количество новообразований различного типа у пациентов, включенных в базу данных. Итак, мы искали неоднородности в распределении пациентов, включенных в базу данных, только в 21-мерном евклидовом пространстве по данным РАК. Затем, если такие кластеры были обнаружены, то мы проводили их предметный анализ с точки зрения нозологических форм, особенностей пациентов или характеристик заболевания. В свою очередь, был рассмотрен и двойкий вопрос. Мы изучали структуру и уровень однородности распределения пациентов в разных кластерах. Другими словами, было очень важно узнать какой показатель РАК играет ключевую роль в формировании кластера.

Таблица 1.

Локализация и вид новообразования. I — злокачественное новообразование; II — доброкачественная опухоль; III — неизвестный тип

Локализация	I	II	III
Голова и шея	33	0	3
ЖКТ	120	15	30
Лёгкое	63	2	15
Кости и хрящи	3	0	0
Кожа	9	5	7
Щитовидная железа и органы внутренней секреции	3	8	0
Кровь, лимфа, связанные с ними ткани	40	0	1
Мезотелиальные и мягкие ткани	11	3	3
Молочная железа	165	1	11
Мужские и женские репродуктивные органы	215	2	17
Мочевыводящие органы	29	5	17
Мозг и ЦНС	6	1	0
без выявленного первичного очага	23	2	7

Методы кластеризации и визуализации

Для выделения групп схожих показателей из общего массива данных мы использовали следующие методы кластеризации: линейный и нелинейный. Первый — это метод динамических ядер, а второй — метод упругих карт. Вкратце остановимся на каждом из них.

Метод динамических ядер — это хорошо описанный и всесторонне исследованный метод кластеризации, подробнее о котором указано в статье [19]. Метод упругих карт — это мощный и продвинутый метод, в основе которого лежит кодирование сложных данных в простые структуры (аппроксимация) и выведение их на экран монитора в виде карты, расположенной в многомерном пространстве и заполненной точками (или другими графическими отображениями). При визуализации

показателей базы данных программа производит кодировку её элементов и далее выводит уже изображение карты с распределившимися на ней показателями в виде точек, способные группироваться (кластеризоваться) при близости данных, которые стоят за ними.

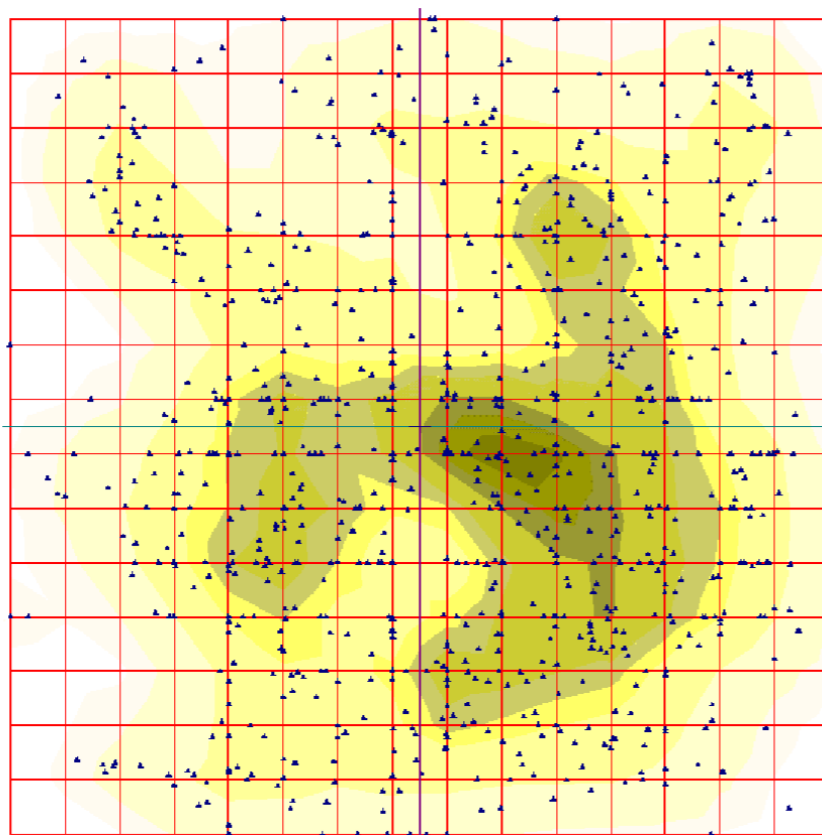


Рис. 1. Распределение пациентов по эластичной карте 16×16 .

Идея, лежащая в основе техники эластичных карт, состоит в том, чтобы как можно точнее уравнивать точки в многомерном пространстве, достигая минимальных (в некотором смысле) преобразований многообразия. Техника эластичных карт обеспечивает нелинейное уменьшение размеров: действительно, она уменьшает размерность набора данных до двух. Опишем подробнее технику эластичных карт. Первый шаг состоит в хорошо известном традиционном подходе — анализ главных компонент [19]. Геометрически первая главная компонента — это направление в исходном евклидовом пространстве, в котором данные разбросаны более всего. Итак, необходимо определить первую и вторую главные компоненты и построить на них плоскость, как на осях. Затем каждую точку данных необходимо спроецировать на плоскость и определить минимальный квадрат, включающий все проекции. На втором этапе каждая точка данных должна быть связана со своей проекцией с помощью (математической) пружины; все пружины здесь должны быть одинаковыми по своей упругости. Это означает, что все пружины имеют одинаковую исходную длину (а точнее равную нулю) и одинаковую эластичность. Кроме того, предполагается, что пружины могут растягиваться бесконечно, и ожидается линейная упругость при любой длине растяжения. Когда все точки соединены со своими выступами математической пружинкой, необходимо заменить исходную (бесконечно) жесткую плоскость (а точнее квадрат) на эластичную мембрану. Мембрана должна быть однородной: она имеет одинаковые свойства эластичности в любой точке, во всех направлениях. Итак, на третьем этапе система освобождается для достижения минимума полной энергии деформации. Последний представляет собой комбинацию упругой деформации

мембраны (расширение, кручение и изгиб) и математической энергии расширения пружины.

Как только достигается равновесная конфигурация, каждая точка данных должна быть повторно определена на деформированной поверхности. Для этого необходимо найти ортогональную проекцию для каждой точки; геометрически это новое изображение точки расположено на деформированной поверхности на ближайшем расстоянии от исходной точки. Для выявления кластерной структуры необходимо вернуть деформированную поверхность в плоское состояние. Для этого необходимо удалить все математические пружины. Это нелинейное преобразование в так называемые внутренние координаты. Очевидно, что выпрямление деформированной поверхности приводит к изменению положения изображений точек набора данных. Проецируемые изображения, расположенные на выпуклой части карты, будут приближаться по мере выпрямления карты; наоборот, проецируемые изображения, расположенные на вогнутой части карты, станут более отдаленными. Это интуитивно понятно, поскольку первый случай означает, что исходные точки были «достаточно сильными», чтобы притянуть к ним эластичную карту; наоборот, второй случай означает, что точки были «достаточно слабыми», чтобы держать карту упругости близко к ним. Таким образом, обратное преобразование, выпрямляющее карту, позволяет визуализировать и кластеризовать (в нелинейном режиме) точки, расположенные в многомерном пространстве. Использовалось свободно распространяемое программное обеспечение *VidaExpert* [20]. Практически из-за вычислительных ограничений никто не реализует эластичную карту в программном обеспечении как непрерывный объект. Напротив, эластичная карта представлена в виде многогранника, и точки связаны с узлами этого последнего, а не с точным изображением проекции. В зависимости от количества узлов в квадрате может быть три типа эластичной карты: жесткая (обычно 12×12), мягкая (16×16) и детализированная (25×25); мы использовали мягкую конфигурацию в наших исследованиях.

Для визуализации распределения точек вновь полученного изображения по карте следует ввести некоторую процедуру кластеризации по локальной плотности. Для этого существует несколько способов [21], однако мы реализуем, вероятно, самый простой из них, основанный на функции локальной плотности.

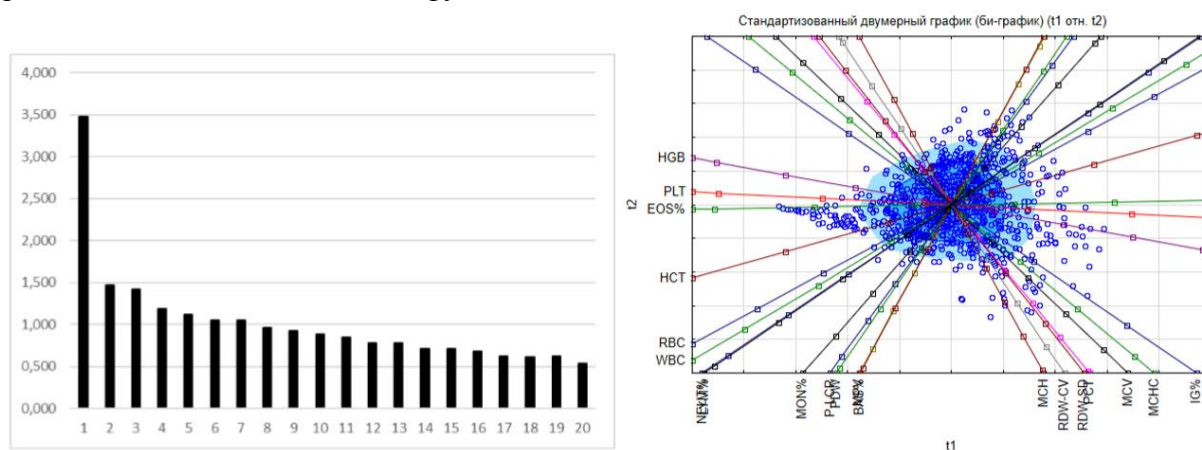


Рис. 2. Вариация собственных значений для рассматриваемого набора данных.

Для этого необходимо снабдить каждую точку изображения на карте упругости функцией Гаусса,

$$f_j(r) = A \cdot \exp \left\{ \frac{(r - r_j)^2}{\sigma^2} \right\}, \quad (1)$$

где r_j — вектор координат (во внутренних координатах) j -й точки. r — радиус-вектор с центром r_j , A — коэффициент, в основном равный 1, а σ (похожий на стандартное отклонение в нормальном распределении) — контрастирующий параметр: он определяет ширину «поля», покрывающей точку.

Следует подчеркнуть, что для простоты функция (1) вращательно-симметрична. Наконец, функция суммы, где N — общее количество точек в наборе данных:

$$F_j(r) = \sum_{j=1}^N f_j(r), \quad (2)$$

а функция (2) показывает функцию локальной плотности, представляющую кластерную структуру в наборе данных, если таковая имеется.

Результаты

Для начала рассмотрим результаты анализа главных компонент и корреляционный анализ исходного набора данных. Чтобы определить эффективную размерность набора данных в линейном приближении, мы провели анализ главных компонент; в частности, мы начали с вычисления собственных значений ковариационной матрицы, полученной из данных. На рис. 2 слева показано изменение собственных значений по мере увеличения их количества. Кривая имеет четкий излом у второго собственного значения; все остальные собственные значения имеют почти линейный характер убывания. Таким образом, эффективное пространственное измерение в нашей базе данных равно единице; тем не менее, вряд ли можно аппроксимировать данные одномерным линейным многообразием: другие собственные значения недостаточно малы, чтобы их опустить. Фактически это означает, что данные в основном рассредоточены по линии, но это распределение довольно широкое и нетривиальное.

На рис. 2 справа показано вышеупомянутое распределение данных в специальной проекции, где первая главная компонента направлена ортогонально плоскости рисунка. Таким образом, оси представляют вклад каждой переменной в картину распределения. Мы изучили классификацию пациентов в базе данных с помощью метода динамических ядер; для $2 \leq K \leq 6$ разумной классификации не наблюдалось, все классификации были очень нестабильными. Это означает, что большая часть пациентов изменила свою принадлежность к классу в серии последовательной серии реализаций данного метода.

На рис. 1 показана кластеризация, полученная с помощью мягкой (16×16) упругой карты, с параметрами эластичности, заданными по умолчанию. На карте выделяется три или четыре кластера, в зависимости от параметра контраста. Также мы изучили распределение различных типов опухолей по карте; типы показаны в таблице 1. Для этого точки на карте были помечены в соответствии с локализацией или типом опухоли. Специфического преобладания в кластерной структуре не наблюдается ни по локализации, ни по типу опухоли (злокачественная или доброкачественная). Такой эффект может быть результатом значительного смещения в распределении типов опухолей в исходной базе данных: она включает 720 записи с диагнозом злокачественной опухоли и только 44 записи с доброкачественными. Подобное отсутствие преобладания в распределении наблюдалось для пола или возраста

пациентов. На следующем этапе изучали распределение пациентов по эластической карте в зависимости от конкретного значения используемых параметров развернутого анализа крови. Фактически, можно найти самые низкие и самые высокие значения для каждого 21 параметра РАК по базе данных. Следует подчеркнуть, что некоторые пациенты демонстрируют показатели, выходящие за рамки нормального диапазона прежних показателей, а некоторые - нет. Итак, промежуток был разбит на 10 равных интервалов, и мы выявили на карте пациентов с разными значениями РАК. Шаг за шагом мы помечали пациентов с уровнем характера, не превышающим λ_j ; здесь λ обозначает символ, а j обозначает номер интервала, $1 \leq j \leq 10$.

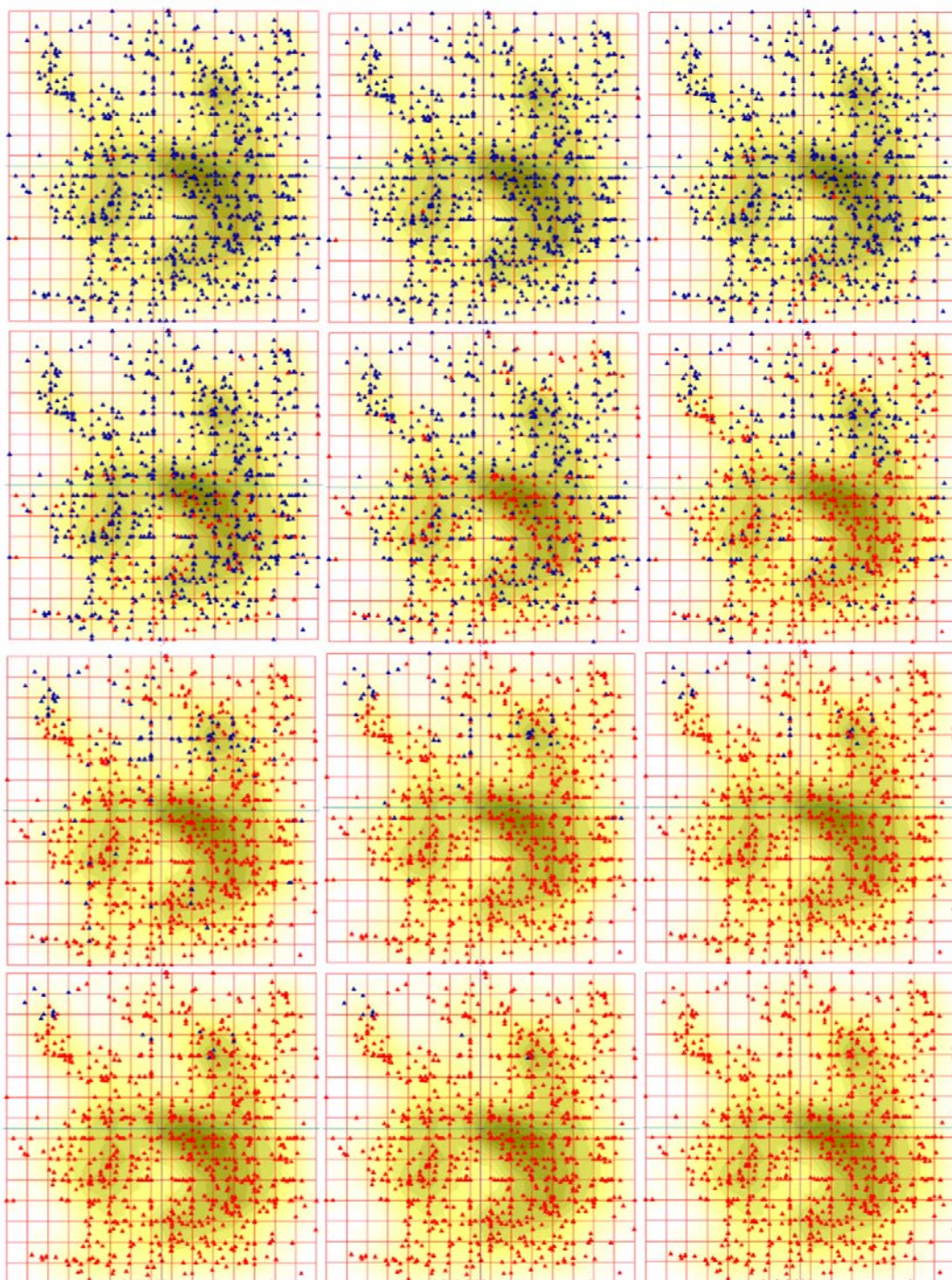


Рис. 3. Волновое распределение пациентов с различным уровнем содержания моноцитов на эластичной карте 16×16 ; см. объяснение в тексте; моноциты.

Было обнаружено, что все показатели крови, в размере 21, разделены на две группы с точки зрения распределения паттернов пациентов на эластичной карте. Вариант, при котором данные больных, в виде точек, хаотично размещались на карте, в виде так называемого “звездного неба”, наблюдался для базофилов, эозинофилов, лейкоцитов и иммуноглобулинов.

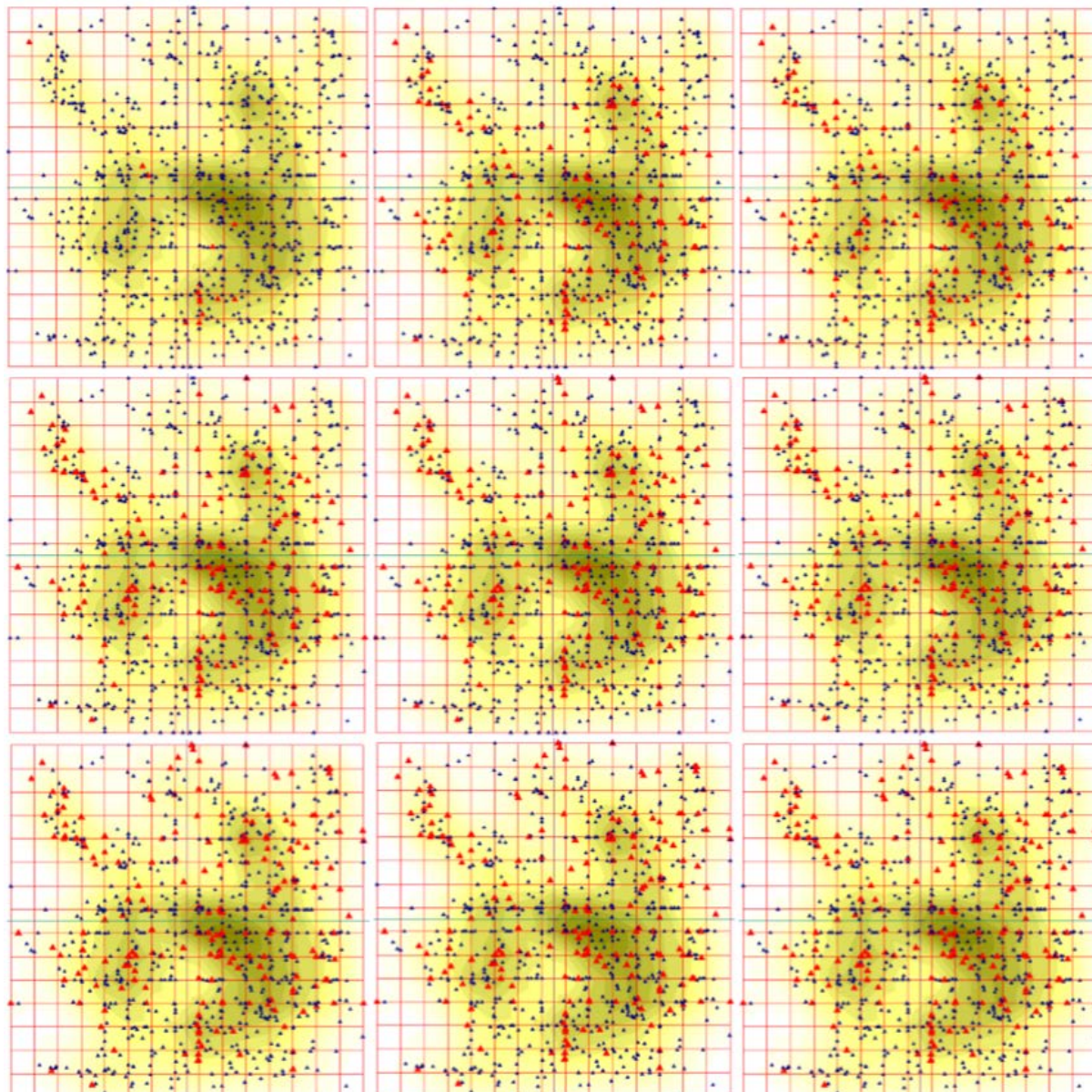


Рис. 4. Распределение по типу звездного неба пациентов с различным уровнем содержания моноцитов по эластичной карте 16×16 см. объяснение в тексте.

Конечно, есть небольшие вариации в деталях внешнего вида “звездного неба” для некоторых пациентов в зависимости от показателей крови. На рис. 4 показана картина типа “звездного неба”, наблюдаемая для распределения содержания эозинофилов по карте. Противоположный тип распределения точек по упругой карте, называемый “волной”, наблюдался у большей части больных. Как только показатель РАК возрастает от наименьшего числа к наибольшему, точки, соответствующие пациентам, имеют тенденцию занимать карту довольно регулярно, слой за слоем. рис. 3 действительно похожа на “движущуюся волну”. Поскольку у пациентов персонажей разные стартовые позиции на карте: это означает, что в базе данных нет (почти) никого, у кого есть минимальные числа двух символов одновременно (см. Подробное

обсуждение ниже). На рис. 3 показана эта волновая картина, наблюдаемая для распределения содержания моноцитов по карте.

Обсуждение

Возникновение злокачественных новообразований — сложный процесс, в котором участвует ряд факторов. В настоящее время не существует универсальной теории классифицировать эти факторы [22 – 25]. В ряде статей приводятся доказательства обширного разнообразия как раковых опухолей, так и стоящих за ними факторов. Таким образом, разработка логически очевидных и информативных предикторов развития злокачественных новообразований все еще остается актуальной проблемой, и в этом направлении сообщается о значительном прогрессе [1, 4, 8, 18, 25]. За этим прогрессом в основном стоят передовые методы молекулярной биологии. Внедрение современных передовых методов нелинейного статистического анализа дает возможность раскрыть знания из классических стандартных процедур и записей данных. Некоторые методы и подходы могут выглядеть достаточно сложными и нестандартными, что требует от исследователя особых усилий и квалификации в обработке данных;

В современном подходе к обработке медицинских данных, основанном на методологии больших данных, есть две фундаментальные проблемы:

- одновременный и комбинированный анализ ряда различных характеристик, которые изначально не были включены в общую теорию, является первой проблемой;
- «моделирование» данных, то есть аппроксимация многомерных объемных данных множеством невысокой размерности - вторая проблема;

Здесь мы реализовали обе эти идеи. Обратимся еще раз к таблице 1. Ни метод упругих карт (см. Рис. 1), ни метод динамических ядер не выявили связи между кластером и нозологической формой злокачественного новообразования; то же самое верно и для доброкачественных новообразований. Такой отказ может быть результатом чрезмерного уточнения локализации и типа рака. Возможно, собрав разные опухоли, имеющие одинаковое онтогенетическое происхождение, можно получить более четкую и очевидную корреляцию между кластеризацией и заболеванием. Упомянутые выше особенности базы данных накладывают некоторые ограничения на анализ и дизайн эксперимента (если таковые имеются). Невозможность собрать референтную группу является ключевым моментом здесь, если не будет определен конкретный фактор, чтобы организовать рандомизацию против этой первой. На практике это означает, что нет возможности собрать группу здоровых доноров крови в качестве контрольной группы для дальнейшего сравнения с больными раком. Основная причина этого заключается в том, что ряд факторов не поддаются контролю. Например, никогда нельзя обеспечить аналогичное географическое распределение членов референтной группы, а также род занятий и т.д. Между тем все эти факторы могут существенно повлиять на структуру распределения. Более того, необходимо собрать отдельную референтную группу для каждого конкретного злокачественного новообразования, включенного в базу данных. Чтобы решить эту проблему, мы проанализировали когорты пациентов. Выявленные особенности опухолей различной локализации могут стать хорошим инструментом для альтернативной диагностики и обследования пациентов.

Теперь остановимся на рис. 3; мы изучили все характеристики РАК, с точки зрения схемы заполнения карты. Оказалось, разные характеристики начинают заполнять карту из разных мест, причем по-своему. Этот факт, видимо, является

проявлением принципа Либиха: любая раковая опухоль является серьезным стрессовым фактором. Таким образом, стресс вызывает мобилизацию ресурсов больного организма, концентрируя их в своеобразном «горлышке бутылки». Самое удивительное здесь то, что в базе данных есть ряд пациентов с различной патологией в разных органах и тканях. И независимо от конкретного типа локализации опухоли, через кластеризацию, обеспечиваемую техникой эластичных карт, мы видим, что имеет место своего рода специализация путей и контуров для мобилизации ресурсов. Действительно, есть только одна пара переменных, которая дает довольно похожий образец заполнения карты по мере роста значений: это гематокрит и гемоглобин. Эта ситуация кажется вполне естественной: коэффициент корреляции между этими двумя переменными очень высок. Эти два параметра РАК начинают заполнять карту от левого края и плавно переходят вправо, сохраняя довольно прямую линию. Напротив, эритроциты начинают заполнять карту из левого верхнего угла и делают это как дуговая волна с центром в левом верхнем углу. Удивительно, но показатели скорости оседания эритроцитов (СОЭ) в какой-то степени напоминают картину заполнения, наблюдаемую для эритроцитов, в то время как она начинается с правого нижнего угла квадрата, таким образом полностью противоположно эритроцитам. Рисунок заполнения моноцитов выглядит как прямой фронт, начинающийся в нижней части карты и плавно поднимающийся вверх с небольшими вариациями фронта. Лейкоциты начинают заполнять карту с правого верхнего угла, так что начальное распределение выглядит полосой. Последний расширяется вниз и (немного) влево, так что левая часть карты заполняется, когда наблюдаются самые высокие значения содержания моноцитов.

Лимфоциты и средний объем эритроцитов дают самые удивительные образцы заполнения. Начинают заполнять карту с двух и трех участков соответственно. Лимфоциты начинают заполнять карту из нижнего левого и верхнего правого углов. Удивительно, но пациенты с наивысшими показателями содержания лимфоцитов агрегированы в центральной части карты, занимая область, расположенную вдоль «главной» диагонали последней, простирающейся от левого верхнего угла к правому нижнему. Картина распределения среднего объема эритроцитов уникальна: она начинает заполнять карту с трех участков. Последние расположены в левом верхнем углу, в правом верхнем и левом нижнем. Описанные выше закономерности заполнения карты однозначно подтверждают распределение пациентов по пространству, определяемому характеристиками общего анализа крови. Не существует стратификации пациентов с точки зрения соответствия кластеров, идентифицированных методом эластичной карты, возрасту, полу или нозологической формы опухоли. Напротив, пациенты стратифицированы по типу ответа на раковую опухоль. Между составом кластера и характером заполнения карты прослеживается очевидная корреляция. Последнее отражает тип и способ мобилизации ресурсов организма, вызванных злокачественным новообразованием, а стратегия стратификации следует принципу Либиха. Это в основном новая стратификация, наблюдаемая у онкологических больных, и все еще необходимы дальнейшие исследования детальных

взаимосвязей между типом ответа и соответствующими важными клиническими аспектами.

Благодарности

Работа поддержана грантом Красноярского государственного медицинского университета им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого, грантом № 2.3 по контракту № 203.

Список литературы

1. Arem H, Loftfield E. Cancer epidemiology: A survey of modifiable risk factors for prevention and survivorship. *American journal of lifestyle medicine*. 2018;12(3):200–210.
2. Kasting ML, Giuliano AR, Reich RR, Roetzheim RG, Nelson DR, Shenkman E, et al. Hepatitis C virus screening trends: serial cross-sectional analysis of the National Health Interview Survey Population, 2013–2015. *Cancer Epidemiology and Prevention Biomarkers*. 2018;27(4):503–513.
3. Albeshan SM, Mackey MG, Hossain SZ, Alfuraih AA, Brennan PC. Breast cancer epidemiology in gulf cooperation council countries: a regional and international comparison. *Clinical breast cancer*. 2018;18(3):e381–e392.
4. Almugren N, Alshamlan H. A Survey on Hybrid Feature Selection Methods in Microarray Gene Expression Data for Cancer Classification. *IEEE Access*. 2019;7:78533–78548.
5. Koval A, Katanaev VL. Dramatic dysbalancing of the Wnt pathway in breast cancers. *Scientific reports*. 2018;8(1):7329.
6. Blagodatski A, Cherepanov V, Koval A, Kharlamenko VI, Khotimchenko YS, Katanaev VL. High-throughput targeted screening in triple-negative breast cancer cells identifies Wnt-inhibiting activities in Pacific brittle stars. *Scientific reports*. 2017;7(1):11964.
7. Ahmed K, Koval A, Xu J, Bodmer A, Katanaev VL. Towards the first targeted therapy for triple-negative breast cancer: Repositioning of clofazimine as a chemotherapy-compatible selective Wnt pathway inhibitor. *Cancer letters*. 2019;449:45–55.
8. Dubey AK, Gupta U, Jain S. Breast cancer statistics and prediction methodology: a systematic review and analysis. *AsianPac J CancerPrev*. 2015;16(10):4237–4245.
9. Орловская ЛА, Солдаткина НВ, Емельянова ЛЭ, Касьяненко ВН, Малейко МЛ, Петров ДС, Дашков АВ, Анапалян ВХ, Донцов ВА, Харагезов ДА, Гончаров ИВ. Интраоперационная химиотерапия на аутосредах организма в улучшении результатов комплексного лечения больных раком молочной железы и толстой кишки. *Известия высших учебных заведений. Северо-Кавказский регион. Естественные науки*. 2005(S10).
10. Dolgova E. Sposob etc. *Clinical Labouratory Diagnostcs*. 2015;60(10).
11. Satparova L, Kogina E, Satparov Y, Galimov S, Knyazeva O, Uduv V. Evaluation of some charateters of biochemical, clinical and immunological analysis of blood of the patients with mammalian cancer. In: *Contemporary aspects of control and regulation*; 2018. p. 246–253.

12. Arlekya I, Pleten' A. Differential diagnostics of carcinoid tumors of gastrointestinal tract. In: Fundametal problems of science; 2017. p. 131–134. 13.
13. Tas EE, Ozgen E, Yavuz AF. Can Preoperative Complete Blood Count Parameters Be Used as Predictive Markers for Lymph Node Metastasis in Endometrial Carcinomas? Cyprus Journal of Medical Sciences. 2018;3(3):168–172.
14. Yayla Abide C, Bostanci-Ergen E, Cogendez E, Kilicci C, Uzun F, Ozkaya E, et al. Evaluation of complete blood count parameters to predict endometrial cancer. Journal of clinical laboratory analysis. 2018;32(6):e22438.
15. Hornbrook MC, Goshen R, Choman E, O'Keeffe-Rosetti M, Kinar Y, Liles EG, et al. Correction to: Early Colorectal Cancer Detected by Machine Learning Model Using Gender, Age, and Complete Blood Count Data. Digestive diseases and sciences. 2018;63(1):270–270.
16. Esteva A, Kuprel B, Novoa RA, Ko J, Swetter SM, Blau HM, et al. Dermatologist-level classification of skin cancer with deep neural networks. Nature. 2017;542(7639):115.
17. Ogasawara A, Matsushita H, Tanaka Y, Shirasugi Y, Ando K, Asai S, et al. A simple screening method for the diagnosis of chronic myeloid leukemia using the parameters of a complete blood count and differentials. Clinica Chimica Acta. 2019;489:249–253.
18. Kourou K, Exarchos TP, Exarchos KP, Karamouzis MV, Fotiadis DI. Machine learning applications in cancer prognosis and prediction. Computational and structural biotechnology journal. 2015;13:8–17.
19. Fukunaga K. Introduction to statistical pattern recognition. London: Academic Press; 1990.
20. Gorban AN, Zinovyev AY. Fast and user-friendly non-linear principal manifold learning by method of elastic maps. In: 2015 IEEE International Conference on Data Science and Advanced Analytics, DSAA 2015, Campus des Cordeliers, Paris, France, October 19-21, 2015; 2015. p. 1–9. Available from: <https://doi.org/10.1109/DSAA.2015.7344818>.
21. Xu D, Tian Y. A Comprehensive Survey of Clustering Algorithms. Annals of Data Science. 2015;2(2):165–193. doi:10.1007/s40745-015-0040-1.
22. Brown KF, Rumgay H, Dunlop C, Ryan M, Quartly F, Cox A, et al. The fraction of cancer attributable to modifiable risk factors in England, Wales, Scotland, Northern Ireland, and the United Kingdom in 2015. British journal of cancer. 2018;118(8):1130.
23. Sakamoto Y, Kokudo N, Matsuyama Y, Sakamoto M, Izumi N, Kadoya M, et al. Proposal of a new staging system for intrahepatic cholangiocarcinoma: analysis of surgical patients from a nationwide survey of the Liver Cancer Study Group of Japan. Cancer. 2016;122(1):61–70.
24. Islami F, Goding Sauer A, Miller KD, Siegel RL, Fedewa SA, Jacobs EJ, et al. Proportion and number of cancer cases and deaths attributable to potentially modifiable risk factors in the United States. CA: A cancer journal for clinicians. 2018;68(1):31–54.
25. Dubey AK, Gupta U, Jain S. Epidemiology of lung cancer and approaches for its prediction: a systematic review and analysis. Chinese journal of cancer. 2016;35(1):71.

МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРАВЛЕНИЯ ЭВАКУАЦИЕЙ ПРИ ПОЖАРЕ ИЗ ЗДАНИЯ СРЕДНЕЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ШКОЛЫ

С.А.Тычина

Институт вычислительного моделирования СО РАН, *zagarskikh.sofia@mail.ru*

Был проведен анализ нормативной документации на предмет проведения тренировочных эвакуаций и действий при пожаре, помимо этого проведен опрос учащихся на тему эвакуации из здания школы, Статья 52 123-ФЗ гласит, что защита людей и имущества от воздействия опасных факторов пожара обеспечивается, в том числе, оповещением и управлением эвакуацией людей при пожаре [1].

В ходе анализа был выделен ряд проблем:

- в школе необходимо проводить тренировочную эвакуацию 2 раза в год, [2] но нет нормативной документации, которая могла бы ответить на вопрос о том, как должен протекать процесс эвакуации в школе;
- персоналу даются лишь общие рекомендации (без привязки к конкретному зданию);
- эвакуацией детей необходимо управлять (так как они не могут сами принимать решения и легко поддаются панике). Учитель - то лицо, которое принимает решение о том, как действовать при эвакуации;
- Учащиеся при любом расположении очага пожара выбирают главный выход из здания в качестве эвакуационного;
- Тренировочные эвакуации позволяют лишь определить время освобождения школы, не учитывая место расположения очага пожара и блокирование путей эвакуации. Не учитывается, что опасные факторы пожара распространяются по зданию.

Таково текущее положение дел, но его можно исправить, с помощью современных методов и подходов. Для повышения качества обеспечения пожарной безопасности за счет проведения наглядного обучения безопасной эвакуации из здания школы можно применить следующий подход: разработать планы тренировочных эвакуаций, которые будут учитывать объемно-планировочные решения и динамику распространения опасных факторов пожара в конкретном здании. Учащимся и персоналу следует формировать действия, согласно расположению очага пожара и учитывая заблокированные пути эвакуации. Вычислительный эксперимент является способом оценивания возможных сценариев развития событий при данных объемно-планировочных решениях. А в задачах пожарной безопасности, когда реальный эксперимент невозможен - единственным.

С помощью компьютерного моделирования процессов развития пожара можно показывать влияние различных условий на исход эвакуации. На основе собранных данных, возможно разработать эффективный план для обучения школьников и персонала безопасному покиданию здания школы. Учитывая популярные планировки школ, используем гидродинамическую модель развития пожара, так как в планировке школ зачастую присутствуют атриумы, лестницы, и индивидуально-поточную модель – для моделирования эвакуации, поскольку контингент средней образовательной школы отличается физическими параметрами. Все расчёты выполнены в программном комплексе «Сигма-ПБ».

В первом рассмотренном сценарии в качестве начальных условий школа была полностью наполнена людьми, при этом были известны начальные положения людей, учащиеся и персонал находят в учебных классах, заданы направления движения, в соответствии с разработанным сценарием. Площадь горизонтальной проекции, время начала эвакуации и скорость детей выбраны согласно нормативной документации [3].

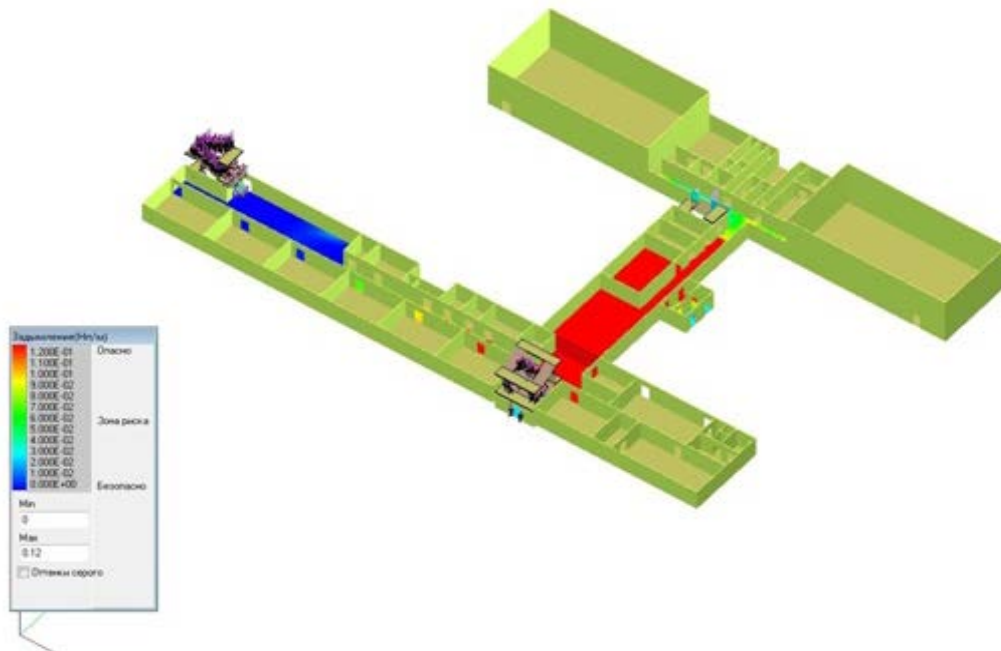


Рис.1 Моделирование тренировочной эвакуации в условиях пожара

Тренировочная эвакуация не предполагает наличие очага пожара, разместим очаг пожара в гардеробе, вблизи главного выхода из здания и зададим направление движения как при тренировочной эвакуации, то есть к ближайшему выходу из здания, таким образом мы смоделируем тренировочную эвакуацию в условиях пожара.

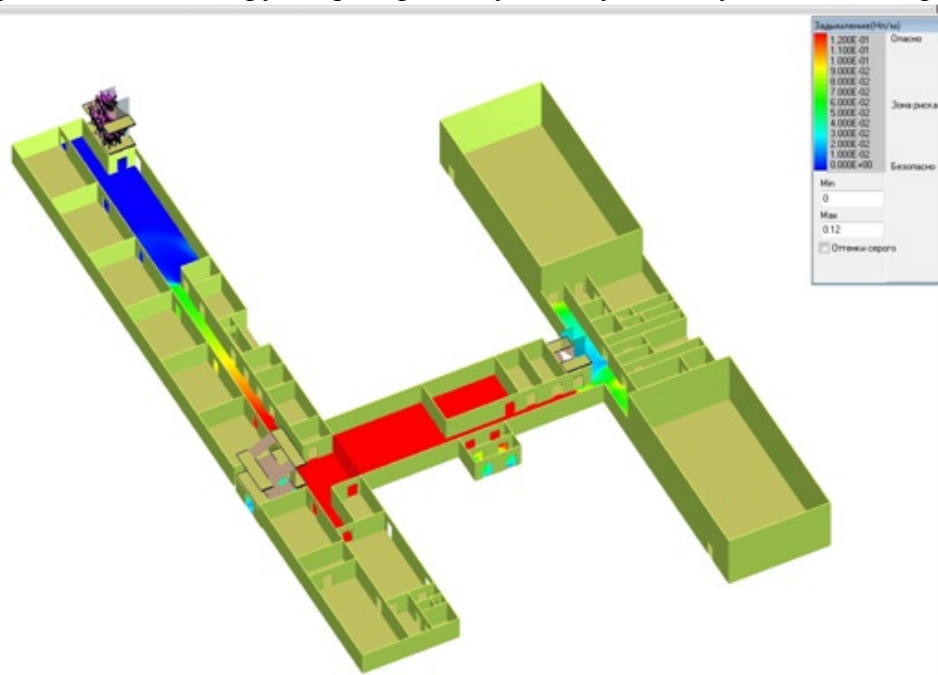


Рис.2 – Моделирование управления эвакуацией

Время начала эвакуации также взято из нормативных документов и составляет 60

секунд. При проведении опроса среди учащихся был сделан вывод, что на покидание класса в условиях эвакуации при пожаре у учащихся уйдет больше времени.

При моделировании Сценария 1 люди двигались к ближайшему выходу из здания, динамика распространения опасных факторов пожара не принималась во внимание. На Рисунке 1 видны скопления у двух выходов из здания. При этом опасные факторы пожара уже достигли критического значения у центральной лестницы. Таким образом можно заключить, что при таких условиях люди не успевают безопасно эвакуироваться.

Расчетным путем было установлено, что для того, чтобы добиться безопасных условий эвакуации необходимо применить управление эвакуацией, направить людей в свободные и не заблокированные опасными факторами пожара пути и выходы. Таким образом можно избежать скоплений, тем самым уменьшив время эвакуации из здания и исключить попадание людей в область, где опасные факторы пожара достигли критических значений.

Во втором рассмотренном сценарии было учтено наличие очага пожара, его расположение и динамика распространения опасных факторов пожара по зданию школы. Также были учтены объемно-планировочные решения для конкретного здания средней образовательной школы. Время начала эвакуации было выбрано согласно данным, полученным из опроса учащихся – 90 секунд.

В сценарии 2 удалось, используя информацию о развитии пожара, задать такое направление движение, чтобы добиться безопасной эвакуации из здания школы.

Учитывая информацию о динамике распространения пожара было задано направление движение учащихся и персонала. Центральный выход из здания школы был принят заблокированным, так как в этой зоне опасные факторы пожара достигают критических значений.

На рисунке 2 видно, что с помощью управления эвакуацией удалось минимизировать скопления людей на центральной лестнице и тем самым избежать их попадание в зоны, где опасные факторы пожара достигли критических значений.

На основе анализа выполненных расчетов, можно сделать вывод о том, что движение кратчайшим путем, как во время тренировочной эвакуации, к ближайшему выходу из здания не всегда является безопасным, некоторые пути эвакуации могут быть заблокированы, нужно понимать, сколько времени имеется на безопасную эвакуацию. В связи с этим необходимо повышать уровень подготовки персонала школы к управлению эвакуацией при пожаре путем инструктирования, делать это эффективно можно на основе рассчитанных сценариев для конкретного здания СОШ.

Список литературы

1. Технический регламент о требованиях пожарной безопасности [Электронный ресурс]: Федеральный закон от 22.07.2008 г. № 123-ФЗ (ред. от 03.07.2016 // Доступ из справочно-правовой системы «КонсультантПлюс»

2. О противопожарном режиме [Электронный ресурс]: постановление Правительства Российской Федерации от 25.04.2012 г. № 390 (ред. от 06.04.2016, с изм. от 17.10.2016) (вместе с «Правилами противопожарного режима в Российской Федерации») // Доступ из справочно-правовой системы «КонсультантПлюс»

3. Об утверждении методики определения расчётных величин пожарного риска в зданиях, сооружениях и строениях различных классов функциональной пожарной опасности [электронный ресурс] : Приказ МЧС от 30.06.2009. №382 ред. от 02.12.2015 // Справочная правовая система «КонсультантПлюс». – Режим доступа: <http://www.consultant.ru>.

**О НЕКОТОРЫХ ОСОБЕННОСТЯХ ДИАГНОСТИКИ
БОЛЕЗНИ ПАРКИНСОНА ПО ДАННЫМ
ПОЗИТРОННО-ЭМИССИОННОЙ ТОМОГРАФИИ С ¹⁸F-ДОПА**

К.О. Тупенко¹, А.А. Хорошавина¹, В.А. Абрамов², Е.А. Карлова², М.Г. Садовский^{1,3}

¹ФГБОУ ВО «Красноярский государственный медицинский университет имени
профессора В.Ф. Войно-Ясенецкого» Минздрава России; *kseniamkib@gmail.com*,

horoshavina-lina-yan@yandex.ru

²ФГБУ «Федеральный Сибирский научно-клинический центр Федерального
медико-биологического агентства России», г. Красноярск; *excalibr@mail.ru*,

elenakarlova67@gmail.com

³Институт вычислительного моделирования СО РАН; *msad@icm.krasn.ru*

Введение

Вторым по частоте встречаемости нейродегенеративным заболеванием является болезнь Паркинсона (БП). Патогенез патологических изменений головного мозга при БП не изучен до конца, ключевым звеном считается гибель нейронов, являющихся важнейшей составляющей экстрапирамидной системы и вырабатывающих дофамин (ДА). БП характеризуется не только двигательными нарушениями, но и большим количеством иных признаков, таких как когнитивные, вегетативные и психические нарушения, сенсорные и диссомнические симптомы [1, 2].

С момента написания Джеймсом Паркинсоном «Эссе о дрожательном параличе» прошло более двухсот лет, но до сих пор человечество не научилось лечить болезнь Паркинсона (БП). В настоящее время проводится множество исследований, посвящённых разработкам лекарства, которое позволит не только остановить развитие заболевания, но и обратить вспять нейродегенеративный процесс [3, 4]. На сегодняшний день, когда эффективного лекарства нет, замедлить развитие патологии можно, начав нейропротекторную терапию до развития явных симптомов. К моменту проявления моторных нарушений погибает 60 – 70 % дофаминергических нейронов, при таком поражении стандартная терапия малоэффективна [5]. Таким образом, доклиническая диагностика заболевания позволяет врачу составить более эффективный план лечения и замедлить развитие патологии.

Для постановки диагноза БП неврологи чаще используют клинические критерии, однако у ряда пациентов встречается клиническая картина, отличная от классической. Однозначно определить недостаток дофамина (ДА) позволяет позитронно-эмиссионная томография (ПЭТ) с радиофармпрепаратом (РФП) ¹⁸F-ДОПА. Данный метод служит для определения этиологии развившегося состояния, что помогает дифференцировать фенотипически сходные заболевания [6].

¹⁸F-ДОПА, являясь аналогом леводопы, взаимодействует с декарбоксилазой ароматических аминокислот (ДАА) и генерирует позитронный выброс [6]. ¹⁸F-ДОПА позволяет оценить активность ДАА в пресинаптических дофаминергических терминалях [7]. У людей, не страдающих БП, отношение поглощения ¹⁸F-ДОПА в каудальном отделе скорлупы к поглощению в хвостатом ядре составляет около 1, тогда как на ранней стадии БП это соотношение составляет около 0,6 [6, 5]. Во время латентного периода и на ранних стадиях развития БП наблюдается уменьшение поглощения ¹⁸F-ДОПА именно в дорсокаудальном отделе скорлупы на контрлатеральной стороне, т.е. стороне, противоположной клиническим проявлениям. Аналогичные изменения отмечаются и на ипсилатеральной стороне, т.е. на стороне клинических симптомов, но в меньшей степени, отражая асимметричность нейродегенеративного процесса [8].

^{18}F -ДОПА также может использоваться для дифференциальной диагностики идиопатического синдрома паркинсонизма и атипичного паркинсонизма, патогенез которого не связан с нарушением дофаминергической передачи. Для этой цели можно использовать зональный анализ стриатума при ПЭТ-сканировании ^{18}F -ДОПА, так как главным отличием этих патологий является более линейное снижение метаболизма ДА от передней к задней части путамена, характерное для идиопатической БП [9]. Также благодаря ПЭТ с ^{18}F -ДОПА возможно наблюдать за прогрессированием дофаминергических нарушений при БП. В исследовании [10] было обнаружено, что все средние значения константы притока в полосатом теле значительно уменьшились в течение интервала между сканированиями, который составил 5 лет. Поглощение ^{18}F -ДОПА с течением времени, продолжительность симптомов обратно коррелировала с годовым снижением РФП в контралатеральной скорлупе.

Материалы и методы

Исследование было проведено на базе Федерального государственного бюджетного учреждения “Федеральный Сибирский научно-клинический центр Федерального медико-биологического агентства”. Для исключения структурных изменений головного мозга и сопоставления ПЭТ-изображений исследуемым проводилась магнитно-резонансная томография (МРТ) головного мозга. МРТ исследование проводилось на аппарате Philips Intera 1,5 T с прицелом на область чёрной субстанции и красных ядер. При удовлетворительных результатах МРТ обследуемые направлялись на ПЭТ с ^{18}F -ДОПА. Из исследования были исключены лица с признаками других неврологических патологий и психических расстройств, лица, имеющие противопоказания к проведению МРТ, беременные и кормящие грудью женщины, люди с соматическими заболеваниями в стадии декомпенсации.

Исследование проводилось в контрольной группе здоровых людей и в группе пациентов с БП. Через 50 минут после введения ^{18}F -ДОПА выполнялось статическое 3D сканирование в течение 20 минут на ПЭТ/КТ-сканере DISCOVERY 600 (GE Healthcare). Проводился анализ абсолютных значений активности (в килобеккерелях на миллилитр — кБк/мл), результаты, получаемые в ходе обследования, представляют собой данные по активности РФП в различных зонах головного мозга: скорлупе (Ск), хвостом ядре (ХЯ) и затылочной коре (ЗК) с двух сторон — справа (R) и слева (L). Также проводился анализ нормализованных показателей, вычисляемых, как отношения активности стриатум / затылочная кора (SOR) и хвостатое ядро / затылочная кора (COR) и стриатум / хвостатое ядро (SCR).

Все полученные данные были занесены в базу в программе Microsoft Excel. Анализ данных проводился в программе IBM SPSS Statistics 26 классическими методами статистики: определялись среднее значение, стандартное отклонение показателей, медиана, квартили, проверялась нормальность распределения с помощью критерия Шапиро-Уилка. Для сравнения группы здоровых и пациентов с БП использовался критерий Стьюдента и критерий Манна-Уитни. Качество бинарной классификации оценивалось при помощи ROC-анализа, для кластеризации и визуализации многомерных данных использовался метод упругих карт.

Результаты

Необходимое количество пациентов в группах вычислялось по формуле:

$$n = \frac{t^2 + \sigma^2}{\Delta^2} \quad (1)$$

где t — критическое значение критерия Стьюдента, для уровня значимости $\alpha=0,05$
 $t=1.96$;

σ — максимальное стандартное отклонение;

Δ – предельно допустимая ошибка (для биомедицинских исследований принимается равной 0,5).

Для подсчёта минимального объёма выборки вычислялось стандартное отклонение во всех исследуемых показателях, в каждой группе выбиралось наибольшее значение. В группе здоровых максимальное стандартное отклонение 0,98 (в показателе СкL), в группе пациентов с БП 0,6 (в показателе ХЯL). Таким образом, для уровня значимости $\alpha=0,05$ минимально необходимый объём выборки здоровых $n=15$ человек, пациентов с БП $n=6$. Предварительный анализ проводился на группах с объёмом 33 здоровых и 12 пациентов с БП, в настоящий момент происходит увеличение группы обследуемых с БП.

Группа здоровых людей состояла из 13 мужчин (39,4%) и 20 женщин (60,6%) в возрасте от 21 до 80 лет. Средний возраст женщин составил $50,8 \pm 15,4$, мужчин $53,7 \pm 14,5$. В группу пациентов вошли люди с верифицированным диагнозом БП, данная группа состояла из 4 мужчин (33,3%) и 8 женщин (66,7%) в возрасте от 42 до 80 лет. Средний возраст женщин составил $60,6 \pm 13,3$, мужчин $53,5 \pm 10,7$. Статистически значимых различий между возрастом условно здоровых людей и пациентов с БП обнаружено не было ($p=0,168$).

На первом этапе был проведён элементарный статистический анализ данных. Каждый из показателей был проверен критерием Шапиро-Уилка на нормальность распределения; оказалось, что в группе здоровых распределение всех абсолютных показателей отлично от нормального, а распределение относительных является нормальным. В группе пациентов с БП распределение всех показателей подчиняется закону нормального распределения, кроме показателя SCRL. В таблице 1 для нормально распределённых данных указаны средние значения $\pm$ стандартное отклонение, для ненормально распределённых – медиана, 1й и 3й квартили.

Таблица 1 – Медиана (Me), 1й и 3й квартили (Q1; Q3), среднее значение (N), стандартное отклонение (σ) показателей в группе здоровых (Зд) и в группе пациентов с БП

	СкR	СкL	ХЯR	ХЯL	ЗКR	ЗКL	SORR	SORL	CORR	CORL	SCRR	SCRL
	Me[Q1;Q3]/ N $\pm\sigma$											
Зд	2,24 [2,02; 2,80]	2,26 [2,02;2, 75]	2,11 [1,78; 2,55]	2,01 [1,74;2, 49]	0,81 [0,71; 1]	0,81 [0,74; 1,02]	2,76 $\pm$ 0,28	2,78 $\pm$ 0,27	2,43 $\pm$ 0,27	2,41 $\pm$ 0,47	1,14 $\pm$ 0,06	1,16 $\pm$ 0,07
БП	1,97 $\pm$ 0 ,49	2,00 $\pm$ 0, 52	2,06 $\pm$ 0,57	2,15 $\pm$ 0, 60	1,03 $\pm$ 0,32	1,05 $\pm$ 0,33	1,96 $\pm$ 0,24	1,95 $\pm$ 0,25	2,03 $\pm$ 0,24	2,08 $\pm$ 0,28	0,97 $\pm$ 0,06	0,91 [0,90; 0,96]

Для оценки различий между двумя исследуемыми группами применялся критерий Стьюдента и критерий Манна-Уитни. Выбор критерия основывался на принадлежности анализируемых данных нормальному закону распределения. Статистически значимые различия между здоровыми и пациентами с БП были обнаружены в уровне захвата РФП в скорлупе с правой стороны, а также по всем относительным показателям ($\alpha=0,001$). Многие исследователи [11, 12, 13] отмечают, что первичное и более интенсивное снижение уровня захвата ^{18}F -ДОПА происходит в зоне скорлупы.

Для оценки качества бинарной классификации при помощи исследования поглощения ^{18}F -ДОПА различными областями головного мозга использовался ROC-анализ. Диагностическая ценность исследования определённой области тем выше, чем ближе площадь под ROC-кривой (AUC) к 1. При площади равной 0,5 метод имеет нулевую диагностическую ценность [14, 15]. В таблице 2 указаны площади под кривыми для всех рассматриваемых показателей с указанием асимптотической значимости.

Таблица 2 – Площади под ROC-кривыми для исследуемых областей мозга

Область мозга	Площадь по ROC-кривой (AUC)	Асимптотическая значимость (p)*
СкR	0,710	0,033
СкL	0,688	0,056
ХЯR	0,534	0,729
ХЯL	0,472	0,778
ЗKR	0,364	0,166
ЗKL	0,340	0,103
SORR	0,997	0,000
SORL	0,997	0,000
CORR	0,879	0,000
CORL	0,806	0,002
SCRR	0,985	0,000
SCRL	0,985	0,000

*при $p < 0,05$ площадь под кривой статистически значимо отличается от 0,5

Исходя из полученных результатов ROC-анализа, наибольшей диагностической ценностью обладают все относительные показатели (SOR, COR, SCR), а также исследование скорлупы справа (СкR). На рисунках 1 – 4 представлены ROC-кривые для наиболее диагностически ценных показателей.

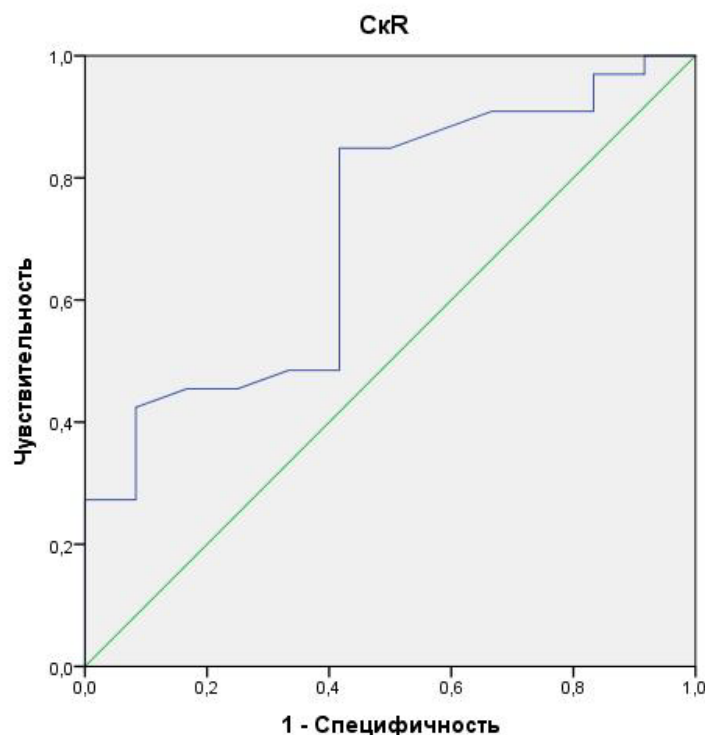


Рис. 1 ROC-кривая для исследования поглощения ^{18}F -ДОПА в области скорлупы справа.

Классические методы статистики, так же, как и ROC-анализ, свидетельствуют о том, что наиболее диагностически значимыми показателями являются уровень захвата РФП в скорлупе справа и все относительные показатели.

Одной из основных функций скорлупы является регулирование движения, данная функция выполняется через взаимодействие с другими структурами, такими как хвостатое ядро, чёрная субстанция и бледный шар. Взаимодействие осуществляется за счёт нейромедиатора – ДА. Для БП характерно нарушение функции нигростриатного дофаминергического пути, при котором наблюдается резкое снижение уровня высвобождения ДА из терминалей стриатума [16]. Скорлупа головного мозга содержит наибольшее количество дофаминергических нейронов, именно с этого отдела, по данным исследователей [6,5], начинается патологический процесс. Даже на ранних стадиях БП в скорлупе погибает значительное число нейронов, благодаря исследованию поглощения РФП именно в этой зоне можно с наибольшей точностью диагностировать данную патологию ($AUC(C\kappa R) = 0,710$).

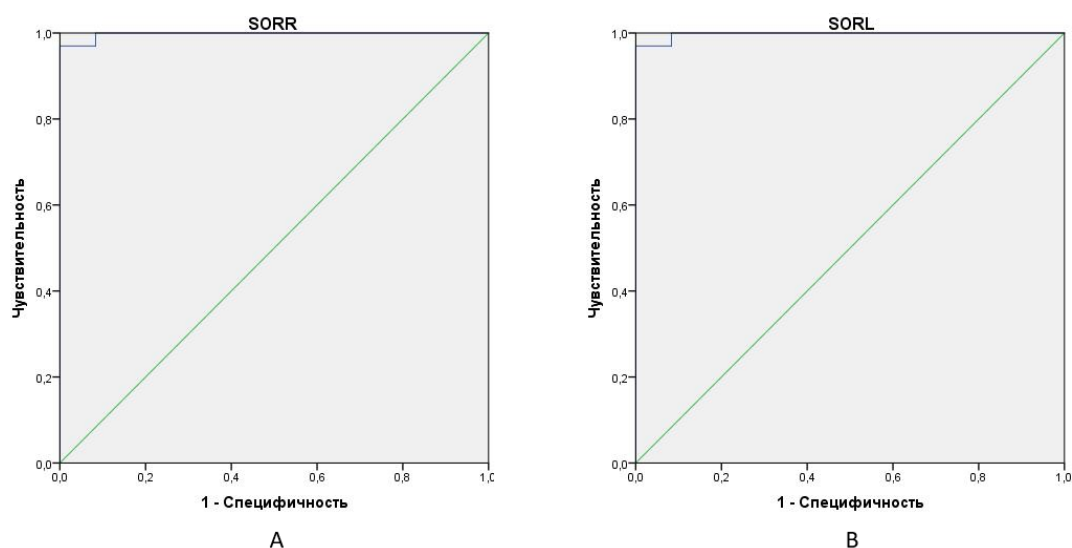


Рис. 2. ROC-кривая для отношения поглощения ^{18}F -ДОПА в области стриатума к поглощению в области затылочной коры

От времени синтеза до момента введения РФП в организм человека проходит некоторое время, которое варьируется в определённых границах. ^{18}F имеет сравнительно небольшой период полураспада ($T_{1/2}=110$ минут), таким образом, каждому человеку поступает различное количество атомов радиоактивного фтора, а значит и вариабельность полученных данных будет больше, с этим могут быть связаны различия в диагностической точности абсолютных и относительных показателей.

Самым диагностически ценным показателем является SORR ($AUC=0,997$), что связано с наибольшей разницей в накоплении РФП в стриатуме и в затылочной коре. В затылочной коре дофаминергические нейроны отсутствуют, или же находятся в незначительном количестве, поэтому показатель активности РФП в этом отделе очень низкий (являясь своего рода референсом), но при этом здесь так же имеют место факторы, связанные с потерей атомов фтора со временем. Диагностическая ценность показателя SCR ($AUC=0,985$ для правой и левой стороны) и COR (для правой стороны

AUC=0,879, для левой AUC=0,806) немного ниже, это связано с меньшей разницей между накоплением в стриатуме и хвостом ядра (SCR), а также хвостом ядра и затылочной коре (COR). Таким образом, относительные показатели имеют большую диагностическую ценность, так как они нивелирует недостатки абсолютных, значение которых могут быть недостаточно точными в связи с процедурой проведения исследования.

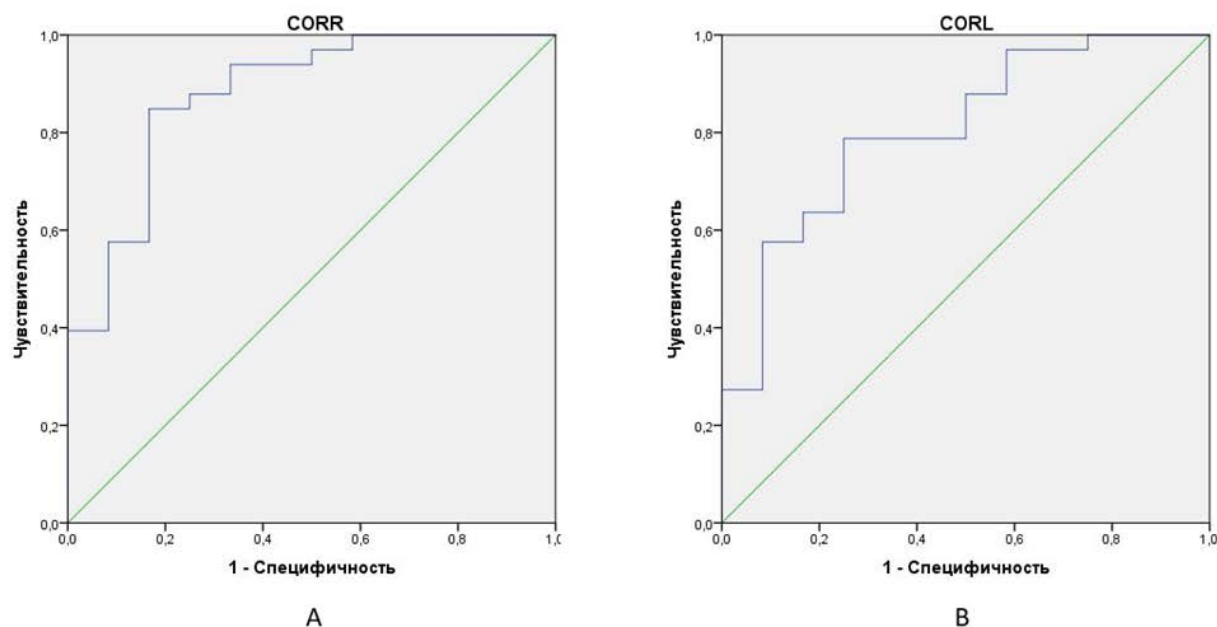


Рис. 3. ROC-кривая для отношения поглощения ^{18}F -ДОПА в области хвостатого ядра к поглощению в области затылочной коры.

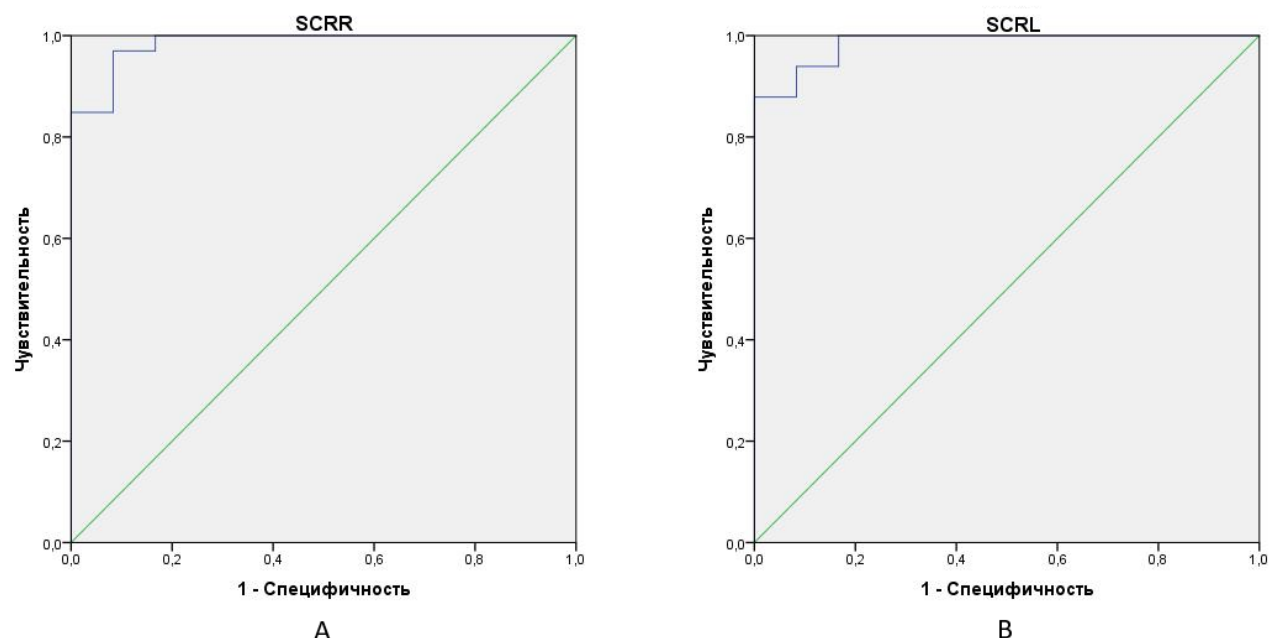


Рис. 4. ROC-кривая для отношения поглощения ^{18}F -ДОПА в области стриатума к поглощению в области хвостатого ядра

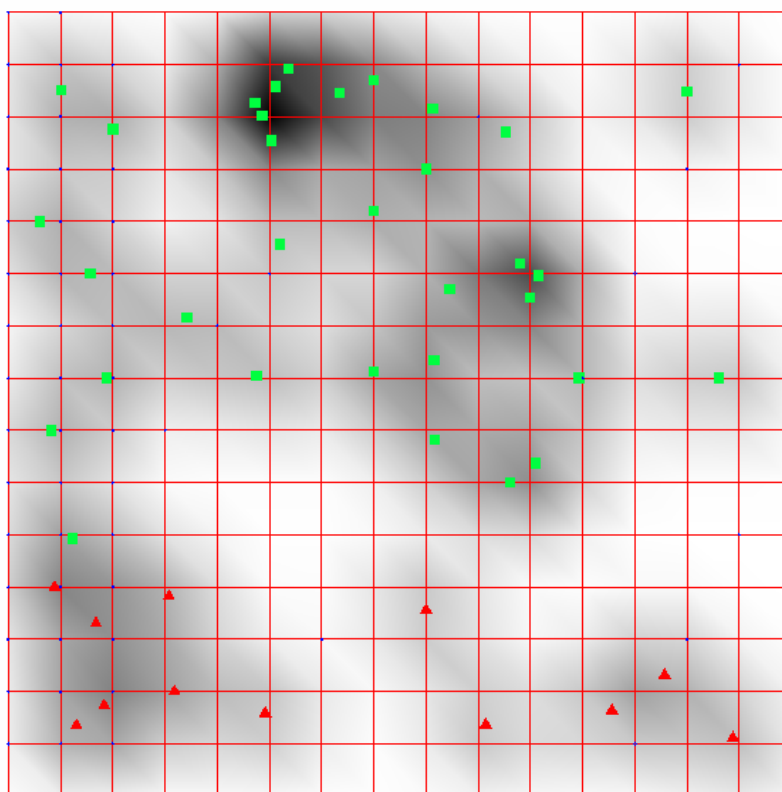


Рис. 5. Упругая карта распределения здоровых людей и пациентов с БП, построенная на основании всех показателей

Для визуализации многомерных данных был использован метод упругих карт [17, 18]. Для построения упругой карты (рисунок 1), были использованы все 12 показателей захвата РФП, зелёными квадратами отмечены здоровые люди, красными треугольниками – люди с БП. На упругой карте видно, что здоровые люди и пациенты с БП достаточно хорошо отделяются друг от друга.

На основании всего вышеизложенного можно сделать вывод, что ПЭТ с ^{18}F -ДОПА является мощным диагностическим инструментом в отношении болезни Паркинсона. А наиболее диагностически значимыми показателями являются активность РФП в скорлупе справа (CKR), а также все нормализованные показатели активности стриатум / затылочная кора (SOR), хвостатое ядро / затылочная кора (COR) и стриатум / хвостатое ядро (SCR).

Список литературы

1. Лытаев С. А. ПЭТ-диагностика когнитивных нарушений у пациентов с болезнью Паркинсона / С.А. Лытаев, Д.С. Сусин // Педиатр. — 2016. — Т.7. — № 2. — С.63–68.
2. Хоменко Ю.Г. Возможности магнитно-резонансной спектроскопии при болезни Паркинсона / Ю.Г. Хоменко, И.В. Милюхина, Е.В. Грачева, Г.В. Катаева, А.А. Богдан, Е.А., Д.С. Сусин // Бюллетень сибирской медицины. — 2020. — Т.18. — № 4. — С.150–160.
3. Fanning S. Lipidomic analysis of α -synuclein neurotoxicity identifies stearyl CoA desaturase as a target for Parkinson treatment / A. Haque, T. Imberdis, et al. // Molecular cell. — 2019. — Т.73. — №5. — С.1001-1014.

4. Gao G. Gold nanoclusters for Parkinson's disease treatment / G. Gao, R. Chen, M. He, J. Li, J. Li, L. Wang, T. Sun // *Biomaterials*. — 2019. — Т.194. — С.36-46.
5. Гранов А.М. Применение технологий ядерной медицины в неврологии, психиатрии и нейрохирургии / А.М. Гранов, Л.А. Тютин, А.А. Станжевский // *Вестник Российской академии медицинских наук*. — 2012. — Т.67. — №9. — С.13–18.
6. Селихова М.В. Позитронная эмиссионная и однофотонная эмиссионная компьютерная томография в оценке состояния моноаминергических систем мозга при экстрапирамидных расстройствах / М.В. Селихова, Е.А. Катунина, А. Воун // *Анналы клинической и экспериментальной неврологии*. — 2019. — Т.13. — №2. — С.69–78.
7. Станжевский А.А. Применение позитронной эмиссионной томографии для диагностики паркинсонизма / А.А. Станжевский, Л.А. Тютин, И.В. Литвиненко // *Лучевая диагностика и терапия*. — 2010. — №3. — 12–19.
8. Катунина Е.А. Методы диагностики болезни Паркинсона на ранних стадиях / Е.А. Катунина, Н.В. Титова, Г.Н. Авакян // *Журнал неврологии и психиатрии им. СС Корсакова*. — 2010. — Т. 110. — №12. — С.112–118.
9. Stormezand G. Intrastratial gradient analyses of 18F-FDOPA PET scans for differentiation of Parkinsonian Disorders / G. Stormezand, L. Chavesa, D. Vallez Garciaa, J. Doorduina, B. De Jongb, K. Leendersb, B. Kremerb, R. Dierckxa // *NeuroImage: Clinical*. — 2020. — С.102161.
10. Hilker R. Nonlinear progression of Parkinson disease as determined by serial positron emission tomographic imaging of striatal fluorodopa F 18 activity / R. Hilker, K. Schweitzer, S. Coburger, M. Ghaemi, S. Weisenbach, A. Jacobs, J. Rudolf, K. Herholz, W. Heiss // *Archives of neurology*. — 2005. — Т.62. — № 3. — С.378–382.
11. Brück A. A follow-up study on 6- [18F] fluoro- L- dopa uptake in early Parkinson's disease shows nonlinear progression in the putamen / A. Brück, S. Aalto, E. Rauhala, J. Bergman, R. Marttila, J. Rinne // *Movement disorders*. — 2009. — Т. 24. — №. 7. — С. 1009-1015.
12. Jokinen P. Simple ratio analysis of 18F-fluorodopa uptake in striatal subregions separates patients with early Parkinson disease from healthy controls / P. Jokinen, H. Helenius, E. Rauhala, A. Bruck, O. Eskola, O. Rinne // *Journal of Nuclear Medicine*. — 2009. — № 6. — С.893–899.
13. Morrish P. K. Clinical and [18F] dopa PET findings in early Parkinson's disease / P.K. Morrish, G.V. Sawle, D.J. Brooks // *Journal of Neurology, Neurosurgery & Psychiatry*. — 1995. — Т.59. — №.6. — С.597-600.
14. Fawcett T. An introduction to ROC analysis // *Pattern recognition letters*. — 2006. — Т.27. — №.8. — С.861-874.
15. Obuchowski N. A. ROC analysis // *American Journal of Roentgenology*. — 2005. — Т.184. — №.2. — С.364-372.
16. Fukunaga K. Inroduction to statistical pattern recognition. New York: London; 1972
17. Луцкий И.С., Евтушенко С.К., Симонян В.А. Болезнь Паркинсона (клиника, диагностика, принципы терапии) / И.С. Луцкий, С.К. Евтушенко, В.А. Симонян // *Международный неврологический журнал*. — 2011. — №5.
18. Gorban A.N., Kégl B., Wunsch, DC. and Zinovyev AY. Principal Manifolds for Data Visualization and Dimension Reduction. / A.N. Gorban, B. Kégl, D.C. Wunsch, A. Y. Zinovyev // *Lecture Notes in Computational Science and Enginee*. — 2008. — 96-130.

ЭПСИЛОН-РАЗЛОЖЕНИЕ ПРИ КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ, РАВНОЙ НУЛЮ¹

В.Н. Удодов

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова,
Инженерно-технологический институт, каф. производственных технологий и
техносферной безопасности, udodov@khsu.ru

ε -разложение является важной частью ренормгруппового подхода, позволяет обосновать парадигму скейлинга и используется в современной теории критических явлений. Показано, что при критической температуре, равной нулю, выражение для критического индекса теплоемкости уже в первом порядке по $\varepsilon = 4 - d$ меняет свой вид. Это, однако, не говорит о нарушении скейлингового подхода, хотя классическое равенство Эссама и Фишера также изменяется. Приведены интерполяционное обобщенное равенство Эссама-Фишера и обобщенное неравенство Рашбрука, верные при любом значении критической температуры, в частности, при критической температуре, равной нулю. Обобщенные соотношения согласуются с ренормгрупповым подходом, ε -разложением и парадигмой скейлинга. Флуктуации считаются классическими (термодинамическими), определены условия, когда это имеет место.

Введение

Критические индексы и парадигма скейлинга лежат в основе современной теории критических явлений и фазовых переходов (ФП) [1-18]. ε -разложение [10, 14, 17] является составной частью ренормгруппового (РГ) подхода [10, 14, 17], дает обоснование скейлингу и позволяет вычислить индексы в лучшем согласии с экспериментальными и численными данными, чем приближение среднего поля [2, 3, 10, 17]. Хотя ε -разложение (и РГ-техника) предложено уже достаточно давно, случай нулевой критической температуры, по-видимому, остался без рассмотрения. Это может показаться странным, так как ФП при нулевой критической температуре («квантовые фазовые переходы») вызывают в последние годы значительный интерес [5-10]. В статье показано, что при нулевой температуре ФП уже в первом порядке по ε критический индекс теплоемкости имеет новый вид. Предложены обобщенное равенство Эссама-Фишера и обобщенное неравенство Рашбрука (согласующиеся с парадигмой скейлинга), правая часть которых при низких температурах может равняться единице. Флуктуации считаются классическими (термодинамическими) [3], определена область температур, когда это законно.

Критический индекс теплоемкости

Сначала напомним вывод выражения для критического индекса теплоемкости, исходя из ε -разложения [14], которое является развитием идей теории ФП Л.Д. Ландау [3, 10, 17]. Сингулярная часть энергии Гиббса G ферромагнетика в теории Ландау ФП второго рода имеет вид [3, 10, 14]

$$G = AM^2 + BM^4, \quad (1)$$

где M – спонтанная намагниченность, которая является однокомпонентным параметром порядка [3, 10]. В состоянии устойчивого равновесия энергия Гиббса минимальна, следовательно, производная от нее по параметру порядка равна нулю

$$\frac{\partial G}{\partial M} = 2M(A + 2BM^2) = 0, \quad (2)$$

¹ Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Республики Хакасия в рамках научного проекта № 18-41-190003.

откуда получим для упорядоченной фазы [3, 10]

$$M^2 = -A/(2B) . \quad (3)$$

Подставляя (3) в (1), найдем энергию Гиббса упорядоченной фазы

$$G = -(A^2)/(4B) . \quad (4)$$

В теории Ландау [3, 14]

$$A = 1/(\xi^2) , \quad (5)$$

где ξ – корреляционная длина. В ε -разложении коэффициент B пропорционален [14]

$$B \propto L^{-\varepsilon} = \xi^{-\varepsilon} , \quad (6)$$

где [10, 14] (d – размерность пространства)

$$\varepsilon = 4 - d . \quad (7)$$

Из (4) получим

$$G \propto \frac{1}{\xi^{4-\varepsilon}} = \frac{1}{\xi^d}, t = T - T_c \rightarrow 0 , \quad (8)$$

однако корреляционная длина пропорциональна [2, 3, 10, 17]

$$\xi \propto |t|^{-\nu} . \quad (9)$$

Выражение (8) приобретает вид

$$G \propto |t|^{d\nu}, t = T - T_c \rightarrow 0 . \quad (10)$$

Эту формулу можно получить и из более общих соображений [18, гл. 4]. Теперь найдем энтропию и теплоемкость

$$S = -\frac{\partial G}{\partial T} \propto |t|^{d\nu-1}, t = T - T_c \rightarrow 0 ,$$

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} \propto T |t|^{d\nu-2} \propto |t|^{-\alpha}, t = T - T_c \rightarrow 0 . \quad (11)$$

Если

$$T_c > 0, t = T - T_c \rightarrow 0 , \quad (12)$$

то (11) (и ε -разложение) дает классическое скейлинговое соотношение [2, 3, 10]

$$\alpha = 2 - d\nu \quad (T_c > 0) . \quad (13)$$

Если

$$T_c = 0, t = T - T_c = T \rightarrow 0 , \quad (14)$$

то (11) примет вид

$$C \propto T |t|^{d\nu-2} = T t^{d\nu-2} = t^{d\nu-1} \propto t^{-\alpha}, t = T \rightarrow 0 , \quad (15)$$

откуда получим новый результат [11]

$$\alpha = 1 - d\nu \quad (T > T_c = 0, T \rightarrow 0) . \quad (16)$$

Заметим, что (14) влияет только на критический индекс теплоемкости [11]. Для индекса корреляционной длины ν в рамках ε -разложения в первом порядке по ε имеем [10, 17]

$$\nu = \frac{1}{2 - \varepsilon/3} \approx (1/2) + \varepsilon/(12) . \quad (17)$$

Для индекса теплоемкости α найдем в том же приближении новую формулу

$$\alpha \approx -1 + \varepsilon/6 \quad (T \rightarrow T_c = 0, T > 0) . \quad (18)$$

Обычный результат [10, 17]

$$\alpha \approx \varepsilon/6 \quad (T \rightarrow T_c > 0)$$

существенно отличается от (18). Таким образом, уже в первом порядке по $\varepsilon = 4 - d$ выражение для критического индекса теплоемкости изменяет свой вид при нулевой критической температуре. На языке РГ-подхода [17] это означает, что критическая размерность теплоемкости Δ_c изменяется при переходе от $T_c > 0$ к $T_c = 0$

$$\Delta_c = d - 2\Delta_r \quad (T_c > 0) \rightarrow \Delta_c = d - \Delta_r \quad (T_c = 0) .$$

Полученные результаты основаны на формуле для вероятности термодинамических (классических) флуктуаций в состоянии равновесия [3, 14]

$$\omega \propto \exp\left(-\frac{\Delta G}{kT}\right) \quad (T > 0) . \quad (19)$$

Эта формула справедлива, если выполняется неравенство для характерного времени [3]

$$\tau \gg \frac{\hbar}{kT} = \tau_0 \quad (T > 0) , \quad (20)$$

где k – постоянная Больцмана. Если $T_c = 0$, то близость к критической температуре определяется неравенством

$$kT \ll J , \quad (21)$$

где J – энергия взаимодействия ближайших соседей (обменный интеграл), например, для модели Изинга [2, 3]. Для одномерных (квазиодномерных) магнетиков (когда теоретически критическая температура равна нулю) обменный интеграл согласно эксперименту часто порядка 10 К [19, 20] (может быть и больше), тогда (21) с запасом будет выполняться уже при температурах порядка 10^{-2} К. Если эту температуру подставить в (20), то оценка даст $\tau_0 \approx 10^{-9}$ сек, то есть (20) будет выполняться (даже при более низких температурах) при временах порядка секунды и флуктуации будут классическими и результаты (16)-(18) будут верны.

Для трехмерного пространства $\varepsilon = +1$ и получим следующие значения индексов теплоемкости

$$\begin{aligned} \alpha &\approx (1/6) > 0 \quad (T \rightarrow T_c > 0, d = 3) , \\ \alpha &\approx -(5/6) < 0 \quad (T \rightarrow T_c = 0, T > 0, d = 3) . \end{aligned} \quad (22)$$

Эти значения отличаются (как и в общем случае) на единицу, причем при переходе к нулевой критической температуре индекс теплоемкости меняет знак, становясь отрицательным. Это, впрочем, согласуется с третьим началом термодинамики [3].

Из общих соображений следует ожидать, что должен существовать плавный переход между этими значениями индекса теплоемкости, так как при изменении внешних параметров критическая температура может изменяться и, в частности, стремиться к нулю [7]. Может быть предложена следующая интерполяционная формула

$$\alpha \approx S_I - 1 + \varepsilon/6 \quad (T \rightarrow T_c \geq 0, \varepsilon = 4 - d) , \quad (23)$$

где S -функция равна [9, 11]

$$S_I = \left(\frac{T_c}{T}\right)^n , \quad (24)$$

иногда необходимо использовать более сложную формулу [15]

$$S_I = (1 + A_1 |t|^m) \left(\frac{T_C}{T} \right)^n \quad (0 < T \approx T_C \geq 0). \quad (25)$$

Здесь $t = T - T_C$, m, n – положительные константы, A_1 – константа любого знака. Вид S -функции диктуется двумя требованиями, согласующимися с парадигмами скейлинга, РГ-подхода и ε -разложения. 1. При $T_C > 0, T \rightarrow T_C, t \rightarrow 0$ S -функция должна стремиться к единице, тогда получится известный результат. 2. При $T \rightarrow T_C = 0$ S -функция должна равняться нулю, тогда получим новую формулу (18) [9, 11]. (24) и (25) удовлетворяют этим условиям. Разумеется, эти формулы являются интерполяционными и вопрос об их точности нуждается в дополнительных исследованиях, в частности экспериментальных.

Теперь проверим выполнение равенства Эссама-Фишера (из представлений скейлинга следует, что штрихованные индексы равны нештрихованным [2, 3, 10, 17])

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2. \quad (26)$$

Сначала используем выражение (18) и формулы для индексов параметра порядка β и восприимчивости γ , полученные в рамках ε -разложения в первом порядке по ε [10, 14, 17]

$$\beta \approx 1/2 - \varepsilon/6, \quad (27)$$

$$\gamma \approx 2\nu \approx 1 + \varepsilon/6. \quad (28)$$

Сумма индексов равна (в первом порядке по ε)

$$\alpha + 2\beta + \gamma \approx 1 \quad (T_C = 0). \quad (29)$$

Это новый вид равенства Эссама и Фишера, который согласуется с идеями скейлинга, РГ-подхода [11, 15] и, как мы видим, с ε -разложением. Заметим, что в рамках идей скейлинга сумма индексов в (29) равна точно единице [11]. Обобщенное равенство Эссама-Фишера имеет вид [11]

$$\alpha + 2\beta + \gamma = S_I + 1 \quad (T_C \geq 0). \quad (30)$$

Из соотношения (30) в качестве частных случаев получаются и классическое равенство Эссама-Фишера (26) и новая формула (29). Выражения (23)-(25) и (30), по-видимому, хотя бы качественно описывают и процесс, когда при изменении параметров (напряженность поля, давление, концентрация компонентов и др.) критическая температура плавно стремится к нулю. Выражение (30) получается, если использовать (23), (27), (28).

Формулы (23) – (25) и (30) вносят новые аспекты в парадигму скейлинга. В общем случае, при температуре T , не равной T_C , критические индексы могут (слабо?) зависеть от температуры и от критической температуры (если она меняется). Но в двух предельных случаях эта зависимость исчезает: 1. $T_C > 0, T \rightarrow T_C, t \rightarrow 0$. 2. $T_C = 0, t = T - T_C = T \rightarrow 0$. Причем, во втором случае отсутствует зависимость индексов от T даже, если $T \neq T_C = 0, T \approx 0$. Обратим внимание на то, что при численных расчетах или при экспериментальных исследованиях достичь в точности критической температуры не представляется возможным [2, 16], если только не использовать различные методы экстраполяции, которые всегда содержат некоторую погрешность. В конце концов, критическую температуру абсолютно точно определить и измерить нельзя. В эксперименте (например, при определении критических индексов)

всегда рассматривается некоторый интервал температур. При низких температурах точность определения T будет задаваться квантовыми флуктуациями.

Заметим, что обобщенное неравенство Рашбука имеет вид [9]

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq (1 + S_I) . \quad (31)$$

Штрихованные индексы относятся к упорядоченной (несимметричной) фазе.

Необходимо различать два случая: 1) $T_c \equiv 0 (T > 0)$; 2) $T_c > 0, T_c \rightarrow 0$. В первом случае ФП при понижении температуры происходит только при абсолютном нуле (но предпереходные явления наблюдаются при конечных температурах, иногда даже близких к комнатным), тогда с самого начала S -функция (24), (25) равна нулю и получаем новые формулы (18), (22), (29). Во втором случае есть линия ФП, которая начинается при конечных температурах и далее при изменении параметров температура ФП плавно обращается в ноль. В этом случае возможны разные варианты, в частности при выборе специальной траектории приближения к точке $T_c = 0$ классические результаты могут оставаться верными, хотя бы приближенно. Например, пусть

$$\frac{T_c}{T} = 0.99 = const, T \rightarrow 0, \quad (32)$$

тогда

$$T_c = 0.99 * T \rightarrow 0, t = 0.01T \rightarrow 0. \quad (33)$$

В этом случае S -функция (25) будет почти равна единице и классические результаты приближенно останутся справедливыми вплоть до абсолютного нуля. Хотя, возможно, последовательный учет квантовых флуктуаций изменит этот вывод.

Полученные результаты справедливы (по крайней мере, качественно) для любых равновесных ФП при любой размерности пространства, в том числе при $T_c = 0$ или при $T_c \rightarrow 0$ (абсолютная температура при этом положительна). Выражения (25) и (30) косвенно подтверждаются данными [12], где левая часть равенства Эссама-Фишера (сумма индексов) по расчетным данным существенно меньше 2 (около 1.5), откуда можно сделать вывод, что константа A_1 (см. (25)) в данном случае отрицательна (в [12] рассмотрена область $T < T_c$). Согласно [21] классическая формула (13) также нарушается (как и равенство Эссама-Фишера). Действительно, перепишем (13) в виде

$$\alpha + d\nu = 2. \quad (34)$$

По данным [21] (см. таблицу) сумма индексов равна ($d = 2$)

$$\alpha + d\nu = 1.806 \pm 0.009 < 2, \quad (35)$$

то есть отклонение от классического равенства составляет 10% с погрешностью около 0.5%. Подчеркнем, что это отклонение не говорит о нарушении парадигмы скейлинга. Обобщенная формула имеет вид

$$\alpha + d\nu = S_I + 1 (T_c \geq 0), \quad (36)$$

где S -функция определяется выражением (25). Если допустить, что в расчетах [21] критическая температура не достигнута хотя бы на 10^{-6} К (при погрешности 0.5% в определении T_c [21] это вполне возможно), то при отрицательной константе A_1 и подобранных константах m, n в (25) отклонение (35) вполне объяснимо.

Закключение

Таким образом, показано, что при нулевой критической температуре эpsilon-разложение приводит к новому выражению для критического индекса теплоемкости (18) уже в первом порядке по ε . Отсюда следует нарушение классических равенства

Эссама и Фишера и неравенства Рашбрука и некоторых других соотношений классического скейлинга при $T_c = 0$. Однако это не говорит о нарушении идей скейлинга, просто при $T_c = 0 (T > 0)$ следствия статического скейлинга имеют новый вид [11]. Причем, при $T_c = 0$ меняются те скейлинговые равенства, которые содержат критический индекс теплоемкости [11].

Предложены обобщенное интерполяционное равенство Эссама и Фишера (30), (25) и обобщенное неравенство Рашбрука (31), которые верны и для случая критической температуры, равной нулю. Обобщенные интерполяционные формулы в предельных случаях (1: при $T_c > 0, T \rightarrow T_c, t \rightarrow 0$; 2: при $T \rightarrow T_c = 0$) согласуются с парадигмой статического скейлинга, ε -разложения и РГ-подхода [11, 17]. Обобщенные формулы, видимо, приближенно верны также и для случая, когда критическая температура является переменной и может стремиться к нулю, как для некоторых квантовых фазовых переходов [5-8], в частности, это возможно для переходов в сверхпроводящее состояние при изменении внешнего магнитного поля [7].

Полученные результаты относятся к равновесным состояниям, возможно, они будут нарушаться при низких температурах из-за квантовых флуктуаций, кроме того при приближении к абсолютному нулю $T \rightarrow T_c = 0$ время релаксации стремится к бесконечности (критическое замедление) [2, 10, 16], что затрудняет экспериментальную проверку. Для выяснения этих вопросов нужны дополнительные исследования при низких температурах, в частности, при критической температуре, равной нулю (абсолютная температура при этом положительна). Еще раз подчеркнем, что флуктуации в работе считаются классическими (термодинамическими) [3] (см. (20), (21)).

Список литературы

1. Погорелов А.А. О критических индексах для λ -перехода в жидком гелии / А.А.Погорелов, И.М.Сулов // Письма в ЖЭТФ. — 2007. — Т.86, Вып.1. С.41 – 47. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0021364007130097>. +
2. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления / Г.Стенли. — М. Мир, 1973. — 425 с.
3. 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.
4. Гинзбург В.Л. Сверхпроводимость и сверхтекучесть (что удалось и чего не удалось сделать) / В.Л. Гинзбург // УФН. — 1997. — Т.167, №4. С.429 – 454. DOI: [10.3367/UFNr.0167.199704f.0429](https://doi.org/10.3367/UFNr.0167.199704f.0429).
5. Rechester A.B. Contribution to the theory of second-order phase transitions at low temperatures / A.B.Rechester // Soviet physics JETP. — 1971. — Т.33. — № 2. С.782 – 796.
6. Sachdev S. Quantum phase transitions / S.Sachdev. — New Haven, USA, Yale University, 1999. — 488 p.
7. Абрикосов А.А. Основы теории металлов / А.А.Абрикосов. — М., ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 598 с.

8. Cano A. On Low-Temperature Structural Phase Transitions / A.Cano, A.P.Levanyuk // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. — 2006. — V.19. — № 3–5. P.417 – 426.
9. Udodov V. Violating of the Essam-Fisher and Rushbrooke Relationships at Low Temperatures / V.Udodov // World Journal of Condensed Matter Physics. — 2015. — V.5, №2. P.55 – 59. DOI: [10.4236 / wjcmp.2015.52008](https://doi.org/10.4236/wjcmp.2015.52008).
10. Паташинский А.З. Флуктуационная теория фазовых переходов. / А.З.Паташинский, В.Л.Покровский. — М., Наука, 1982. — 382 с.
11. Удодов В.Н. Новые следствия гипотезы статического подобия при низких температурах / В.Н.Удодов // Физика твердого тела. — 2015. — Т.57. — Вып.10. С.2018 – 2022. DOI 10.1134/S1063783415100340.
12. Муртазаев А.К. Критические свойства фрустрированных спиновых систем на слоистой треугольной решетке / А.К.Муртазаев // УФН. — 2008. — Т.178. — №9. С.1001 – 1006.
13. Прудников В.В. Исследование маргинального влияния дефектов структуры на неравновесное критическое поведение двумерной модели Изинга / В.В.Прудников, П.В.Прудников, П.Н.Маляренко, Л.Н.Щур // ЖЭТФ. — 2020. — Т.157. — С.308 – 326.
14. Гиттерман М. Фазовые превращения. Краткое изложение и современные приложения / М.Гиттерман, В.Хэлперн. — М., Ижевск. НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2006. — 128 с. [M. Gitterman, V. Halpern, Phase Transitions. A Brief Account with Modern Applications, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. Bar-Ilan University, Israel (2004)].
15. Удодов В.Н. Новая модельная классификация равновесных фазовых переходов / В.Н.Удодов // Южно-сибирский научный вестник. — 2019. — №1(25). С.131 – 136.
16. Камилов И.К. Исследование критической динамики магнитоупорядоченных кристаллов ультразвуковыми методами / И.К.Камилов, Х.К.Алиев // УФН. — 1998. — Т.168. — № 9. С.953 – 974.
17. Васильев А.Н. Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике / А.Н.Васильев. — ПИЯФ РАН, СПб., 1998. — 774 с.
18. Ма Ш. Современная теория критических явлений / Ш.Ма. — Мир, М., 1980. — 296 с.
19. Williams J.J.M. Single crystal susceptibility measurements of a one-dimensional Ising ferromagnet, FeTaB / J.J.M.Williams, C.P.Landee // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 1993. — V.119. I.3. — P.353 – 361.
20. Liu T.F. An azide-bridged homospin single-chain magnet: $[\text{Co}(\text{2,2' -bithiazoline})(\text{N}_3)_2]_n$ / T.F.Liu, D.Fu, S.Gao, Y.Z.Zhang, H.L.Sun, G.Su // J. Am. Chem. Soc. — 2003. — V.125. — P.13976.
21. Муртазаев А.К. Исследование двумерной анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями в области перехода из ферромагнитного состояния в парамагнитное / А.К.Муртазаев, Ж.Г.Ибаев // ЖЭТФ. — 2020. — Т.157. — № 1. С.101 – 108.

ТРЕМОР И ОЛЬФАКТОМЕТРИЯ КАК ИНСТРУМЕНТЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ БОЛЕЗНИ ПАРКИНСОНА И ЭССЕНЦИАЛЬНОГО ТРЕМОРА

А.А. Хорошавина¹, К.О. Туценко¹, В.А. Абрамов², М.Е. Туник^{1,2},
Д.В. Похабов^{1,2}, М.Г. Садовский^{1,3}

¹Красноярский государственный медицинский университет,

horoshavina-lina-yan@ya.ru, kseniamkib@gmail.com

²Сибирский клинический центр ФМБА РФ, *excalibr@mail.ru,*

tsuprikova.mary.maria@yandex.ru

³Институт вычислительного моделирования СО РАН, *msad@icm.krasn.ru*

Введение

Одними из самых распространенных нозологий в неврологии являются болезни экстрапирамидной системы, в частности болезнь Паркинсона (БП) и эссенциальный тремор (ЭТ). Однако, несмотря на разработанные клинические рекомендации и появление современных методов диагностики, при дифференциальной диагностике данных заболеваний нередко случаются ошибки [1].

Причиной затруднений при дифференциальной диагностике БП и ЭТ, как правило, является схожая симптоматика. Данные заболевания имеют такой общий симптом, как дрожание. Тремор является основным клиническим проявлением при БП и ЭТ и одной из основных жалоб при обращении к врачу, так как дрожание заметно ухудшает качество жизни таких пациентов [1, 2, 3]. Кроме того, проблемы при дифференциальной диагностике данных патологий могут возникать на ранних этапах их развития, когда клинические проявления ещё минимальны, или при наличии у пациента признаков сразу обоих заболеваний [3, 4].

Диагностические ошибки в дальнейшем приводят к терапевтическим, поэтому успех лечения напрямую зависит от верной дифференциальной диагностики. Начало терапии на ранних этапах развития данных заболеваний также значительно увеличивает её эффективность и позволяет замедлить развитие болезни. Для обеспечения возможности начала лечения ещё до появления явных симптомов необходима ранняя адекватная диагностика групп населения с повышенным риском развития данных патологий и родственников пациентов [5, 6]. Более того, постановка верного диагноза важна также и с прогностической точки зрения. Было установлено, что течение ЭТ в первые годы развития и его дальнейшее прогрессирование наиболее доброкачественно по сравнению с БП [1].

Отличительной особенностью болезни Паркинсона является тремор покоя, который значительно снижается или исчезает при активных движениях пациента. Для ЭТ, напротив, характерен постурально-кинетический тремор, возникающий при движении и/или при произвольном удержании определенной позы [2]. Кроме того, тремор при данных заболеваниях (в классических случаях) отличается по частоте, амплитуде, типу дрожания, вовлечению конкретных частей тела и т.д. Таким образом, определение специфических характеристик тремора помогает распознавать и различать эти два заболевания [2, 3, 4, 7].

Помимо двигательных нарушений данные патологии имеют ряд немоторных симптомов, которые также могут служить важными диагностическими признаками. Одним из таких признаков является ольфакторная дисфункция при БП. Установлено, что обонятельные нарушения у людей с БП возникают задолго до возникновения двигательных расстройств [5, 6, 8 – 12]. Это обусловлено тем, что нейродегенерация

начинается именно в обонятельных луковицах головного мозга. Для ЭТ характерен иной механизм развития и, соответственно, данного симптома у больных с ЭТ, как правило, нет [13]. Следовательно, ольфакторная дисфункция может служить не только ранним диагностическим признаком БП, но и может помочь при дифференциальной диагностике БП с ЭТ, а также другими заболеваниями, при которых обоняние, как правило, сохранено [10 – 12, 14 – 15].

Исходя из всего вышесказанного, можно сделать вывод, что данные, описывающие основные характеристики тремора пациентов с БП и ЭТ, и данные их обонятельной функции могут помочь в постановке правильного диагноза даже на ранней стадии развития заболевания. Однако практически отсутствуют научные сведения о взаимосвязи тремора и расстройств обоняния. Таким образом, целью данной работы является исследование обонятельной функции и тремора у пациентов с БП и ЭТ в качестве метода дифференциальной диагностики данных заболеваний, а также проверка гипотезы об обратной пропорциональной зависимости степени нарушения обоняния и выраженности тремора у данных групп больных.

Материалы и методы

Диагностика состояния ольфакторной функции проводилась при помощи Sniffin' stick test («Burghart Messtechnik», Germany) [16], с определением трех показателей: пороговой чувствительности, дифференциальной чувствительности и идентификации конкретного запаха.

Первый субтест (определение порога обоняния) проводится по следующей схеме. Имеется 16 триплетов (уровней) по три фломастера: один из трех с н-бутанолом в разных концентрациях на каждом уровне – чем выше уровень, тем ниже концентрация запаха. Основная задача пациента — выбрать один из трех фломастеров, который на его взгляд имеет запах. Основная цель данного субтеста – определить минимальную концентрацию одоранта, которую исследуемый способен отличить от плацебо.

Второй субтест (дискриминация запахов): каждому пациенту предлагалось 16 триплетов, в каждом из которых один из запахов отличался от двух других, задача обследуемого - определить этот отличающийся запах.

Третий субтест (идентификация) состоял из 16 фломастеров с различными запахами, название каждого из которых пациент должен выбрать из 4 предложенных вариантов. Следуя стандартному протоколу, ольфакторная функция обследуемых оценивалась по результатам всех трёх субтестов: в каждом субтесте максимально можно было набрать по 16 баллов, итоговые баллы суммировались между собой, сумма баллов выше 30 – показатель нормы, 17-29 баллов показатель гипосмии, а ниже 16 – anosmia. Обонятельная способность была исследована у 45 пациентов с БП, 40 человек с ЭТ и 64 условно здоровых людей (контрольная группа).

Параметры тремора исследовались с помощью беспроводного комплекса мониторинга электрофизиологических сигналов «Колибри». Исследование проводилось на четырёх датчиках: на кистях и предплечьях обеих рук. Каждый модуль регистрации фиксировал три основных показателя: поверхностная электромиограмма (ЭМГ), гироскоп и акселерометр. Аппарат регистрировал такие параметры, как частота и амплитуда каждого из трёх показателей. Благодаря беспроводной дистанционной записи параметры тремора были зарегистрированы как в покое, так и в движении. Всего исследование тремора включало 5 тестов. В первом тесте показатели были определены в покое; во втором испытуемые находились в положении стоя с закрытыми глазами и вытянутыми прямо перед собой руками (поза Ромберга); в третьем и

четвертом теста испытуемые касались правой и левой рукой соответственно кончика носа, находясь в положении стоя с закрытыми глазами; пятый тест проводился в движении - испытуемые передвигались по комнате. Дрожание было проанализировано у 90 человек: 30 условно здоровых людей и по 30 пациентов с диагнозами «болезнь Паркинсона» и «эссенциальный тремор».

Все полученные данные занесены в общую базу в программе Microsoft Excel. Анализ данных проводился в программе IBM SPSS Statistics 23 классическими методами статистики: определение среднего значения, стандартного отклонения, медианы и квартилей, был использован критерий Шапиро-Уилка для проверки на нормальность распределения, а также критерий Стьюдента и критерий Манна-Уитни для сравнения полученных результатов. Кроме того, данные были обработаны нелинейным методом упругих карт в программе VidaExpert. Само исследование проводилось на базе ФСНКЦ ФМБА России и Красноярского государственного медицинского университета.

Результаты и обсуждение

Обонятельная способность была исследована у 45 пациентов с БП, 40 человек с ЭТ и 64 условно здоровых людей (контрольная группа). Группа здоровых людей состояла из 33 мужчин и 31 женщины в возрасте от 20 до 79 лет. С БП было протестировано 15 мужчины и 30 женщин в возрасте от 35 до 78 лет, с диагнозом ЭТ - 12 мужчины и 28 женщин в возрасте от 22 до 82 лет. Все результаты, полученные в соответствии со стандартным протоколом исследования, обобщены и представлены в виде баллов (табл. 1). Для данных, распределение которых не отличается от нормального, в таблице указаны средние значения $\pm$ стандартное отклонение, для ненормально распределенных – медиана, 1й и 3й квартили.

Таблица 1

Результаты исследования обонятельной функции

	Тест 1	Тест 2	Тест 3	Сумма по результатам 3-х тестов, количество испытуемых и процентное соотношение		
	Среднее значение, баллы	Среднее значение, баллы	Среднее значение, баллы	Аносмия	Гипосмия	Нормосмия
Здоровые	5,11 $\pm$ 2,32	12 [10; 13]	11,28 $\pm$ 2,18	3 (4,7 %)	32 (50 %)	29 (45,3 %)
ЭТ	4 [1,75; 6]	10 $\pm$ 2,65	10,5 [8,75; 12]	2 (5 %)	31 (77,5 %)	7 (17,5 %)
БП	2 [1; 4]	9 [7; 10]	6,87 $\pm$ 2,69	14 (31,1 %)	30 (66,7 %)	1 (2,2 %)

Далее все полученные данные были проверены на нормальность распределения с помощью критерия Шапиро-Уилка, после чего между всеми группами по каждому показателю были произведены сравнения. Статистический метод выбирался исходя из нормальности распределения: если данные распределены нормально, то сравнение осуществлялось критерием Стьюдента, если распределение отличается от нормального, то был использован критерий Манна-Уитни. В результате были найдены статистически значимые различия между всеми группами исследуемых на уровне значимости $\alpha = 0,05$.

Таким образом, классические методы статистики показали, что полученные данные в различных группах обследуемых отличаются между собой. Однако необходимо проверить, насколько хорошо эти данные способны разделить

обследуемых людей на кластеры, соответствующие каждой группе (здоровые, люди с БП и люди с ЭТ), если изначально не указывать, какие из данных относятся к той или иной группе. Для решения этой задачи используется кластеризация без учителя, которую мы проводили нелинейным методом упругих карт [17, 18]. Данный метод служит для сокращения размерности данных и их визуализации.

На рисунке 1 представлена кластеризация обследуемых по результатам всех 3-х субтестов. На полученных упругих картах здоровые люди отмечены зелёным цветом, красным – люди с БП, синим – люди с ЭТ. На рисунке 1А видно, что все группы слились в единые точки, это наглядно доказывает, что 1 субтест не способен различить исследуемые группы между собой, в ситуации со 2 (рис. 1Б) и 3 субтестом (рис. 1В) группы больных и здоровых различимы.

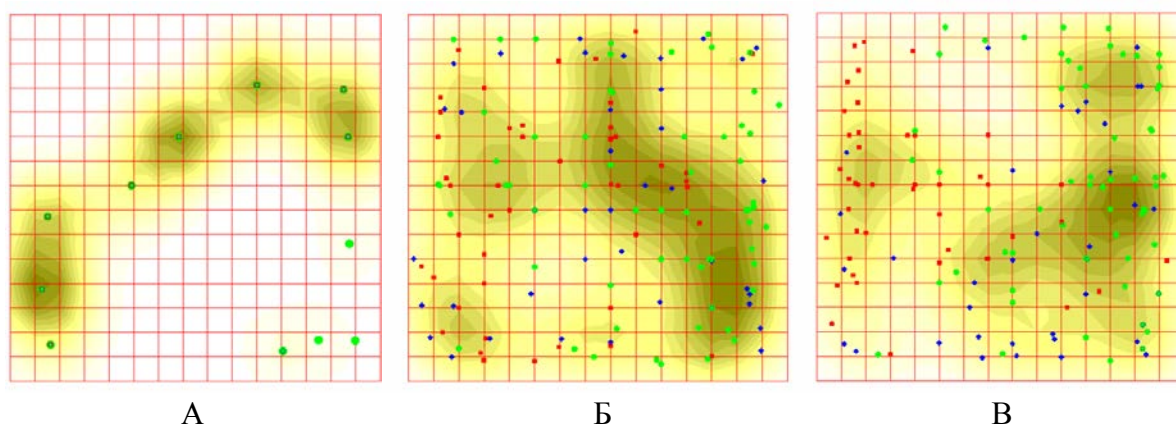


Рисунок 1. Упругая карта распределения обследуемых по результатам 1 субтеста (А), 2 субтеста (Б), 3 субтеста (В)

Представленные выше результаты позволяют предположить, что заявленный авторами теста порядок определения порога обоняния и является источником систематической ошибки. Доказательство данного предположения, а также описание предложенной нами модернизации протокола проведения 1 субтеста более подробно описаны в статье [19].

Также следует поговорить и о недостатках третьего субтеста, в котором определялась способность обследуемых к идентификации запахов. Напомним, что испытуемым необходимо было определить, что именно за запах они почувствовали и выбрать правильный вариант из четырёх предложенных. Некоторые из запахов, предложенных авторами теста, не подходят для проведения данного исследования в нашем регионе, что объясняется этническими и культурными особенностями населения Красноярского края. Например, такие названия запахов, как «лакрица», «скипидар» и «анис» знакомы далеко не всем. Для решения этой проблемы и модификации данного субтеста в дальнейшем, в настоящий момент проводится дополнительное исследование, результаты которого в скором времени будут опубликованы в отдельной статье.

Помимо тестирования обонятельной функции, у 90 человек, из которых 30 условно здоровых людей и по 30 пациентов с диагнозами БП и ЭТ, было проанализировано дрожание. Был проведён анализ на наличие различий по показателям тремора между исследуемыми группами с использованием стандартных методов статистики. Подробно о полученных результатах можно прочитать в статье [20].

Так как количество показателей, характеризующих тремор пациентов, значительно превышает количество показателей обонятельной функции (280 и 52 соответственно), целесообразно выбрать из них наиболее информативные. Кроме того, это позволит значительно упростить как сбор данных, так и их обработку.

Существуют различные способы уменьшить размерность данных, одним из основных является метод главных компонент (principal component analysis, PCA), который мы и попытались применить для имеющихся данных. Метод был применён для всех показателей дрожания (за исключением показателей, дисперсия которых была равна нулю). Оказалось, что все данные тремора шарообразны, то есть линейно данный метод ничего не выделяет и не позволяет уменьшить размерность до желаемого количества.

Было принято решение построить гистограммы распределения по каждому из показателей тремора и выбрать только те показатели, гистограммы которых наиболее близки к гистограммам нормального распределения, то есть унимодальные и имеют куполообразную форму.

Далее была построена упругая карта, включающая только выбранные показатели тремора (рисунок 2А), а также карта, включающая данные обонятельных тестов и выборочные данные исследования тремора рук пациентов (рисунок 2Б). Красным квадратом обозначены люди с БП, синим треугольником — пациенты с диагнозом ЭТ.

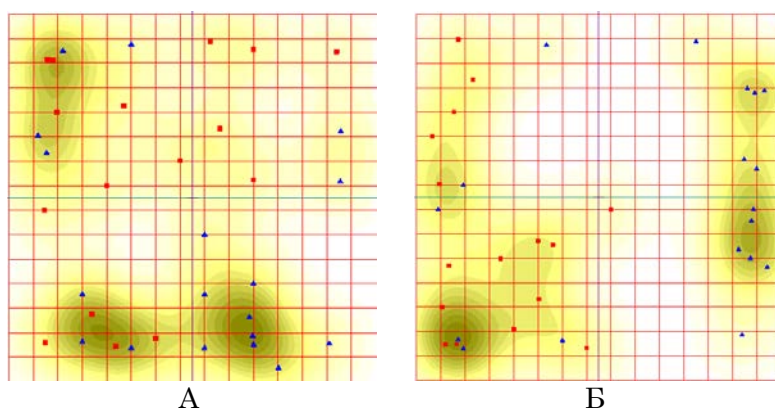


Рисунок 2. Распределение людей с БП и ЭТ по выборочным результатам исследования тремора (2А) и сочетания выборочных показателей тремора и результатов обонятельных тестов (2Б)

На полученных картах видно, что при объединении данных исследования тремора и обонятельной функции, пациенты с различными заболеваниями хорошо разделились друг от друга, образовав 3 отдельных кластера (рисунок 3).

Следующим шагом было проведено сравнение показателей людей, входящих в разные кластеры, между собой. В итоге сравнения полученных кластеров между первым и вторым статистически значимое различие было обнаружено лишь по одному показателю (сумма баллов в 3 субтесте), что можно объяснить значительным преобладанием в данных кластерах пациентов с одним и тем же заболеванием (БП). Между первым и третьим, а также вторым и третьим кластерами были обнаружены статистически значимые различия как по показателям тремора, так и по показателям обоняния. Это говорит о том, что третий кластер, включающий исключительно пациентов с ЭТ, значительно отличается от двух других. Более того, из исследуемых показателей тремора различия были найдены только в данных, характеризующих угол отклонения конечности в кинетическом тесте (данные гироскопа).

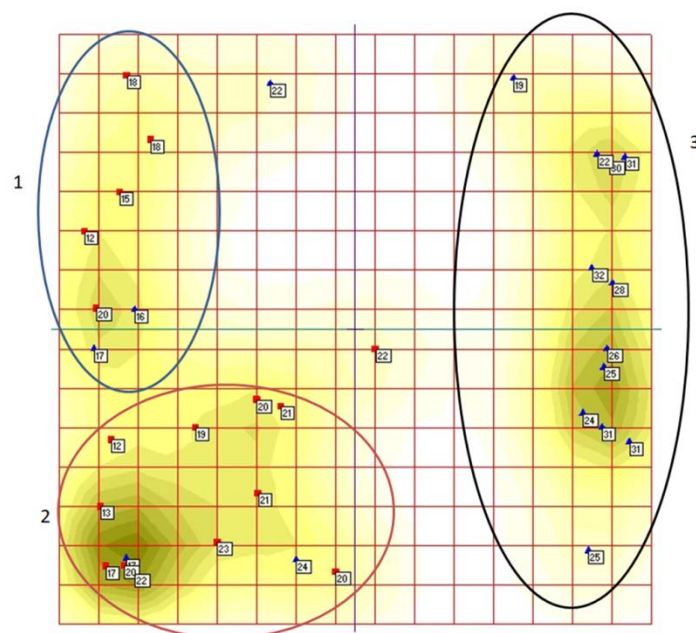


Рисунок 3. Кластеры людей с БП и ЭТ

Анализ количественной оценки обонятельной функции показал, что у пациентов в 3 кластере (люди с ЭТ) обоняние лучше, чем у пациентов из 1 и 2 кластеров. Если просмотреть значения каждого из показателей тремора, то станет ясно, что у пациентов, попавших в 3 кластер, они выше. Таким образом, это подтверждает высказанную нами гипотезу об обратной зависимости выраженности тремора и степенью снижения обоняния. Можно предположить, что больные с ЭТ, попавшие в 1 и 2 кластеры, имеют более неблагоприятный вариант течения болезни, так как известно, что и у части больных с ЭТ развиваются когнитивные и аффективные осложнения, а выраженность дрожания при этом уменьшается [21].

Таким образом, сочетание исследования обонятельной функции и определения основных характеристик тремора пациентов с БП и ЭТ может значительно повысить точность дифференциальной диагностики данных заболеваний и помочь в постановке верного диагноза как в дебюте заболевания, так и в сложных клинических случаях. Кроме того, исследование этих характеристик может помочь с прогностической точки зрения, что полезно для планирования стратегии лечения пациента на отдаленную перспективу.

Список литературы

1. Труфанов, Е. А. Дифференциальный диагноз болезни Паркинсона и эссенциального тремора / Е.А. Труфанов // Медицинский вестник юга России. – 2013. – № 1. – С. 73–79.
2. Говорова, Т. Г. Тремор: классификация, клиническая характеристика / Т. Г. Говорова, А. А. Таппахов, Т. Е. Попова, У. Д. Антипина // Consilium Medicum. – 2018. – Т. 20, № 9. – С. 95–100.
3. Иванова, Е. О. Клинико-электрофизиологический анализ дрожательного гиперкинеза при эссенциальном треморе и болезни Паркинсона / Е. О. Иванова, П. А. Федин, А. Г. Брутян, И. А. Иванова-смоленская, С. Н. Иллариошкин // Неврологический журнал. – 2013. – Т. 18. – №. 5. – С. 21–26
4. Титова, Н. В. Тремор при болезни Паркинсона и эссенциальном треморе: практические аспекты дифференциальной диагностики / Н. В. Титова, Ю. Н. Бездольный, И. В. Штучный, Д. А. Сибецкий // Медицинский совет. – 2019. – № 9. – С. 46–54.

5. Морозова, С. В. Обонятельные расстройства у пациентов с нейродегенеративными заболеваниями / С. В. Морозова, Д. М. Савватеева, Е. И. Петрова // Неврологический журнал. – 2014. – Т. 19. – №. 1. – С. 4–8.
6. Черникова, И. В. Клинические предикторы болезни Паркинсона / И. В. Черникова, З. А. Гончарова, Х. И. Хадзиева, Е. А. Рабаданова // Кубанский научный медицинский вестник. – 2015. – № 3(152). – С. 134–139.
7. Kwon, K. Comparison of motor and non-motor features between essential tremor and tremor dominant Parkinson's disease / K. Kwon, H. M. Lee, S. Lee, S. H. Kang, S. Koh // Journal of the Neurological Sciences. – 2016. – № 361. – P. 34–38.
8. Алексеева, Н. С. Нарушения обоняния при болезни Паркинсона / Н. С. Алексеева, С. Н. Иллариошкин, Т. А. Пономарева, Е. Ю. Федотова, И. А. Иванова-Смоленская // Неврологический журнал. – 2012. – №17(1).
9. Вознесенская, А. Е. Расстройства обоняния человека как маркер нейродегенеративных заболеваний / А. Е. Вознесенская, М. А. Ключникова, Е. И. Родионова, В. В. Вознесенская // Сенсорные системы. – 2011. – №25(1). – С. 17–32.
10. Krismer, F. Sniffing the diagnosis: olfactory testing in neurodegenerative Parkinsonism / F. Krismer, B. Pinter, C. Mueller, P. Mahlknecht, M. Nocker, E. Reiter, A. Djamshidian-Tehrani, S. M. Boesch, G. K. Wenning, C. Scherfler, W. Poewe // Parkinsonism & related disorders. – 2017. – № 35. – P. 36–41.
11. Fullard, M. E. Olfactory dysfunction as an early biomarker in Parkinson's disease / M. E. Fullard, J. F. Morley, J. E. Duda // Neuroscience bulletin. – 2017. – № 33(5). – P. 515–525.
12. Nielsen, T. The use of olfactory testing when diagnosing Parkinson's disease - a systematic review / T. Nielsen, M. B. Jensen, E. Stenager, A. D. Andersen // Danish medical journal. – 2018. – № 65(5). – P. 1–10.
13. Васечкин, С. В. Современные подходы к диагностике и лечению эссенциального тремора / С. В. Васечкин, О. С. Левин // Журнал неврологии и психиатрии им. СС Корсакова. Спецвыпуски. – 2018. – Т. 118, № 6. – С. 64–72.
14. Жукова, И. А. Анализ методов оценки обоняния у пациентов с болезнью Паркинсона / И. А. Жукова, Н. Г. Жукова, О. П. Ижболдина, М. А. Никитина, В. М. Алифорова // Журнал неврологии и психиатрии. – 2015. – Т. 115, № 6–2. – С. 44–49.
15. Godoy, M. D. Olfaction in Neurologic and Neurodegenerative Diseases: A Literature Review / M. D. Godoy, R. L. Voegels, F. D. Pinna, R. Imamura, J. M. Farfel // International Archives of Otorhinolaryngology. – 2015. – № 19. – P. 176–179.
16. Hummel, T. Sniffin' Sticks: Olfactory Performance Assessed by the Combined Testing of Odor Identification, Odor Discrimination and Olfactory Threshold / T. Hummel, B. Sekinger, S. R. Wolf, E. Pauli, G. Kobal // Chemical Senses. – 1997. – № 1. – P. 39–52.
17. Фукунага, К. Введение в статистическую теорию распознавания образов // М.: Наука. – 1979. – 765 С.
18. Gorban, A.N. Principal manifolds for data visualization and dimension reduction / A. N. Gorban, B. Kégl, D. C. Wunsch, A. Y. Zinovyev // Berlin: Springer. – 2008. – Vol. 58. – P. 96–130.
19. Похабов Д.Д. Определение пороговой чувствительности обонятельного восприятия у больных экстрапирамидными заболеваниями / Д.Д. Похабов, М.Е. Туник, В.Г. Абрамов, К.О. Туценко, А.А. Хорошавина, М.Г. Садовский, Д.В. Похабов // Сибирское медицинское обозрение. - 2020. - №2. - С.58-66.20.
20. Похабов Д.В. О сочетанном применении обонятельных и кинестетических тестов для дифференциальной диагностики болезни Паркинсона и эссенциального тремора / Д.В. Похабов, Д.Д. Похабов, В.Г. Абрамов, М.Е. Туник, К.О. Туценко, А.А. Хорошавина, М.Г. Садовский // Нейроинформатика, её приложения и анализ данных. - Красноярск, Материалы XXVII Всероссийского семинара. - 2019. - С.87-95.
21. Иванова Е. О. и др. Клинико-электрофизиологический анализ дрожательного гиперкинеза при эссенциальном треморе и болезни Паркинсона // Неврологический журнал. – 2013. – Т. 18. – №. 5.

УСТОЙЧИВОСТЬ НАЧАЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ ВЕРШИНЫ ДЕНДРИТА ПРИ РОСТЕ КРИСТАЛЛА ИЗ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА

О. Н. Шабловский, Д. Г. Кроль

Учреждение образования «Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого», *shablovsky-on@yandex.ru*

Введение

Проблема роста кристалла из переохлажденного расплава чистого вещества имеет следующий важный аспект: морфологические свойства фронта кристаллизации и возникновение боковых ветвей дендрита. Современное состояние теоретических и экспериментальных исследований дендритообразования представлено в статьях [1-5]. Рост поверхности свободного дендрита характеризуется высокой степенью нестационарности. По мере увеличения переохлаждения однокомпонентного расплава усиливается роль локально-неравновесного теплопереноса, поэтому при формулировке исходной задачи применяется релаксационная модель Максвелла, а математической моделью фазовой границы кристаллизации служит поверхность сильного разрыва, на которой выполнены условия динамической совместности. Рассматривается класс поверхностей роста, скорость перемещения которых зависит только от локальной формы этой поверхности [2]. Предвестниками неустойчивости макроскопических форм поверхности роста служат изломы, изгибы, складки, генерирующие возмущение кривизны исходной поверхности.

Цель данной работы: проанализировать устойчивость / неустойчивость начального состояния дендрита и определить взаимосвязи между пространственно-временными параметрами его вершины.

Уравнение роста дендрита

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 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 $\mathbf{N}$ 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.

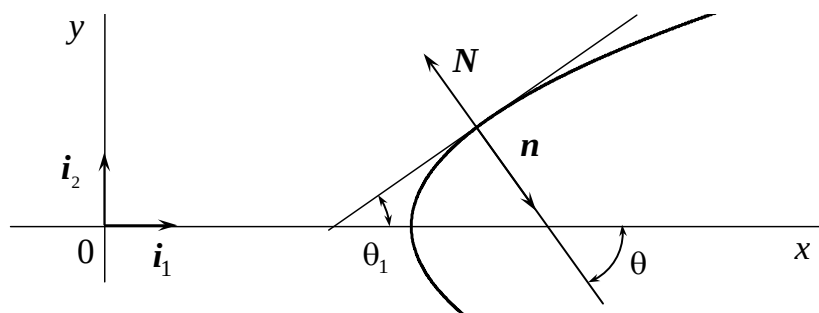


Рис. 1. Угол θ_1 заострения линии роста.

На ФГК имеем следующие три условия.

I. Баланс энергии: $q_j = N(c_j T_j - c_* T_*) + NT_c(c_* - c_j) - Q$, $Q = L \left(N + \gamma_j \frac{\partial N}{\partial t} \right)$, который является следствием интегрального закона сохранения энергии. Здесь звездочкой отмечены параметры расплава перед ФГК; индекс j указывает, что значение функции определено на правой стороне сильного разрыва, в твердой фазе; c – объемная теплоемкость; q_j – нормальная к границе составляющая вектора теплового потока; расплав находится в однородном отрелаксировавшем состоянии: $q_* \equiv 0$, $T_* \equiv \text{const}$. Теплофизические свойства расплава и кристалла берем постоянными. Это допущение оправдано тем, что относится к уже сформировавшемуся сильному разрыву.

II. Известная кинетическая связь $|N| = \mu(T_e - T_j)$, $T_e = T_c[1 - (UK/L)]$, определяющая нормальный механизм роста из расплава. Здесь T_e – температура равновесия между твердой и жидкой фазами.

III. Отклонение температуры кристалла T_j от равновесного значения T_c постулируем в следующей форме [6]: $(T_c - T_j) = (\cos \theta)^\delta B$, $\delta > 0$, где $B \equiv \text{const}$ либо $B = B(t)$, $t \geq 0$. Параметр δ характеризует неоднородность переохлаждения на ФГК. Для аналитических расчетов наиболее удобны целые нечетные значения δ . Данная связь означает, что проявления неравновесных свойств температуры T_j в основном локализованы в окрестности вершины $\theta = 0$. Величина $B = T_c - T_j(\theta = 0)$ – это переохлаждение на вершине дендрита. Чем больше δ , тем отчетливее проявляется переход температуры T_j к равновесному значению T_c .

Изучим вариант $\delta = 3$ для плоской фазовой границы. Уравнение роста $N \equiv (\partial F / \partial t) / G = -\mu(T_e - T_j)$ с учетом записанных выше соотношений принимает вид:

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

Возмущенное состояние вершины дендрита

Построим на основе (1) плоский стационарный контур, скорость перемещения которого не зависит от времени:

$$F(y, t) = A_1 t + A_2(y), \quad A_1 \equiv \text{const} < 0, \quad (2)$$

$$A_2(y) = \frac{1}{a^2} \ln \left(\frac{1+E}{2} \right) - \frac{b}{a} y, \quad E = \exp(2aby), \quad \frac{dA_2(y)}{dy} \equiv A(y) = \frac{b(E-1)}{a(E+1)},$$

$$a = (-\varphi A_1)^{1/2} > 0, \quad b = (\alpha B + \varphi A_1)^{1/2} > 0, \quad -\mu B < A_1 < 0.$$

Это решение удовлетворяет условиям на оси симметрии $y = 0$: $A_2 = 0$, $dA_2 / dy = 0$.

Выполнив линеаризацию

$$F(y, t) = A_1 t + A_2(y) + f(y, t),$$

где $f(y, t)$ – малое возмущение стационарного контура, получаем на основе (1), (2) уравнение

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \varphi(1 + A^2) \frac{\partial f}{\partial t} + 2A_1 \varphi A \frac{\partial f}{\partial y}.$$

Решение строим в виде

$$f(y, t) = [B_2(y) \sin kt + D_2(y) \cos kt] \exp(rt), \quad t \geq 0; \quad r < 0, \quad k \geq 0, \quad y \geq 0, \quad (3)$$

$$\frac{1}{\varphi} \frac{d^2 B_2}{dy^2} = (1 + A^2)(B_2 r - D_2 k) + 2A_1 A \frac{dB_2}{dy}, \quad (4)$$

$$\frac{1}{\varphi} \frac{d^2 D_2}{dy^2} = (1 + A^2)(B_2 k + D_2 r) + 2A_1 A \frac{dD_2}{dy}. \quad (5)$$

Обсудим поведение решения системы (4), (5) в окрестности вершины $y = 0$, где $E(y)$ мало отличается от единицы, и тогда $A(y) \cong 0$:

$$\frac{d^2 B_2}{dy^2} = r\varphi B_2 - k\varphi D_2, \quad \frac{d^2 D_2}{dy^2} = k\varphi B_2 + r\varphi D_2.$$

Отсюда выводим одно дифференциальное уравнение 4-го порядка:

$$\frac{d^4 B_2}{dy^4} - 2\varphi r \frac{d^2 B_2}{dy^2} + \varphi^2 (k^2 + r^2) B_2 = 0.$$

Действуя стандартным образом, решение берем в виде $B_2 y = \exp(yZ)$ и получаем характеристическое уравнение

$$Z^4 - 2\varphi r Z^2 + \varphi^2 (k^2 + r^2) = 0,$$

которое определяет корни $Z = Z_1 + iZ_2$. Результатом вычислений является следующее общее решение:

$$B_2(y) = (C_1 \cos Z_2 y + C_3 \sin Z_2 y) \exp(y n_1) + (C_2 \cos Z_2 y + C_4 \sin Z_2 y) \exp(-y n_1); \quad (6)$$

$$Z_1 = \pm n_1, \quad n_1 = \left(\frac{\varphi}{2}\right)^{1/2} \left[r + \sqrt{k^2 + r^2}\right]^{1/2}, \quad Z_2 = \left(\frac{\varphi}{2}\right)^{1/2} \left[\frac{k}{r + \sqrt{k^2 + r^2}}\right]^{1/2}, \quad r \neq 0, \quad k > 0;$$

$$D_2 = \frac{r}{k} B_2 - \frac{1}{k\varphi} \frac{d^2 B_2}{dy^2}. \quad (7)$$

Здесь C_1, C_2, C_3, C_4 – произвольные постоянные. С учетом начальных условий

$$y = 0, \quad B_2 = B_2^0, \quad D_2 = D_2^0, \quad (dB_2/dy) = B_2^1, \quad (dD_2/dy) = D_2^1$$

записываем линейные алгебраические уравнения, определяющие эти константы:

$$C_1 + C_2 = B_2^0,$$

$$C_1(n_1^2 - Z_2^2) + C_2(n_1^2 - Z_2^2) + 2n_1 Z_2 C_3 - 2n_1 Z_2 C_4 = \left(\frac{r}{k} B_2^0 - D_2^0\right) k\varphi,$$

$$C_1 n_1 - C_2 n_1 + C_3 Z_2 + C_4 Z_2 = B_2^1,$$

$$C_1 n_1 (n_1^2 - 3Z_2^2) - C_2 n_1 (n_1^2 - 3Z_2^2) + C_3 Z_2 (3n_1^2 - Z_2^2) + C_4 Z_2 (3n_1^2 - Z_2^2) = \left(\frac{r}{k} B_2^1 - D_2^1\right) k\varphi.$$

Определитель этой системы ненулевой:

$$\Delta = 16n_1^2 Z_2^2 (n_1^2 + Z_2^2).$$

Из (2.6) ясно, что в окрестности вершины решение устойчивое по координате y , если $C_1 = 0, C_3 = 0$. В результате расчетов имеем

$$C_1 = \frac{\Delta_1}{\Delta}, \quad C_3 = \frac{\Delta_3}{\Delta};$$

$$\frac{\Delta_1}{4n_1 Z_2^2} = B_2^0 2n_1(n_1^2 + Z_2^2) + B_2^1(-\varphi r + 3n_1^2 - Z_2^2) + D_2^1 k \varphi; \quad (8)$$

$$\frac{\Delta_3}{4n_1 Z_2} = B_2^0[r\varphi(n_1^2 + Z_2^2) - n_1^4 + Z_2^4] - D_2^0 k \varphi(n_1^2 + Z_2^2) + B_2^1[n_1 r \varphi - n_1(n_1^2 - 3Z_2^2)] - D_2^1 n_1 k \varphi. \quad (9)$$

Два соотношения устойчивости $\Delta_1 = 0$, $\Delta_3 = 0$ связывают между собой четыре константы B_2^0 , D_2^0 (параметры формы носика дендрита) и B_2^1 , D_2^1 (параметры, определяющие угол заострения линии роста). Следовательно, любые две из этих констант, входящих в устойчивое решение (6), могут быть выбраны произвольно.

Условия $\Delta_1 = 0$, $\Delta_3 = 0$ демонстрируют хорошо выраженную взаимосвязь между режимом эволюции во времени линии роста (параметры r и k) и пространственными (морфологическими) свойствами возмущенной вершины дендрита (параметры B_2^0 , D_2^0 , B_2^1 , D_2^1). Из совместного рассмотрения формул (3) и (6) ясно, что элементами структуры возмущения $f(y, t)$ являются комплексы вида

$$\exp(rt \pm yn_1), \quad \cos Z_2 y \sin kt, \quad \sin Z_2 y \cos kt; \quad r \neq 0, \quad k > 0.$$

Это значит, что возмущение $f(y, t)$ содержит в качестве аргументов две волновые координаты

$$rt \pm yn_1, \quad kt \pm yZ_2.$$

Скорости распространения этих волн

$$N_1 = \frac{|r|}{n_1} = \frac{|r|}{(\varphi/2)^{1/2} (r + \sqrt{k^2 + r^2})^{1/2}}, \quad N_2 = \frac{k}{Z_2} = \frac{(r + \sqrt{k^2 + r^2})^{1/2}}{(\varphi/2)^{1/2}}$$

удовлетворяют связи $N_1^2 N_2^2 = 4r^2 / \varphi^2$.

Анализ соотношений устойчивости

Рассмотрим следующие параметры начального состояния возмущенного носика дендрита:

$$\text{возмущение угла заострения } \delta\theta_1 = \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_{t=0, y=0} = D_2^1;$$

этот термин мы применяем для краткости: строго говоря, здесь вычисляется возмущение $\text{ctg}\theta_1$;

$$\text{возмущение кривизны } \delta K = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right)_{t=0, y=0} = \varphi(kB_2^0 + rD_2^0);$$

$$\text{возмущение угловой скорости касательной к линии роста } \delta\omega = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial t} \right)_{t=0, y=0} = kB_2^1 + rD_2^1;$$

возмущение углового ускорения касательной к линии роста

$$\delta\varepsilon = \left(\frac{\partial^3 f}{\partial y \partial t^2} \right)_{t=0, y=0} = 2krB_2^1 + (r^2 - k^2)D_2^1.$$

На рисунках 2, 3 для никеля на плоскости (r, k) построены изолинии перечисленных четырех возмущений.

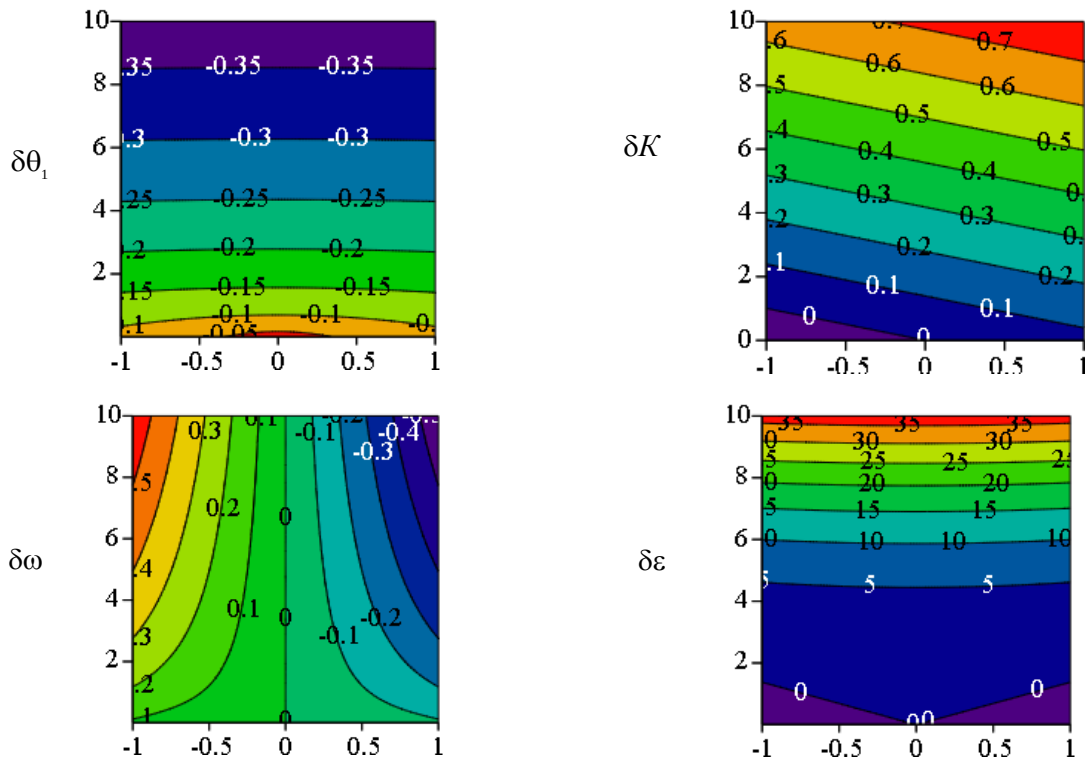


Рис. 2. – Никель. Изолинии - на плоскости (r, k) - параметров начального состояния носика дендрита. Входные параметры: $\mu = 9,53 \text{ м/(К} \cdot \text{с)}$, $N = 5,3 \text{ м/с}$,

$$\alpha = 6.842 \cdot 10^5 (\text{К} \cdot \text{м})^{-1}, \varphi = 7.18 \cdot 10^4 \text{ с/м}^2, D_2^0 = 0,1, B_2^0 = 0,1.$$

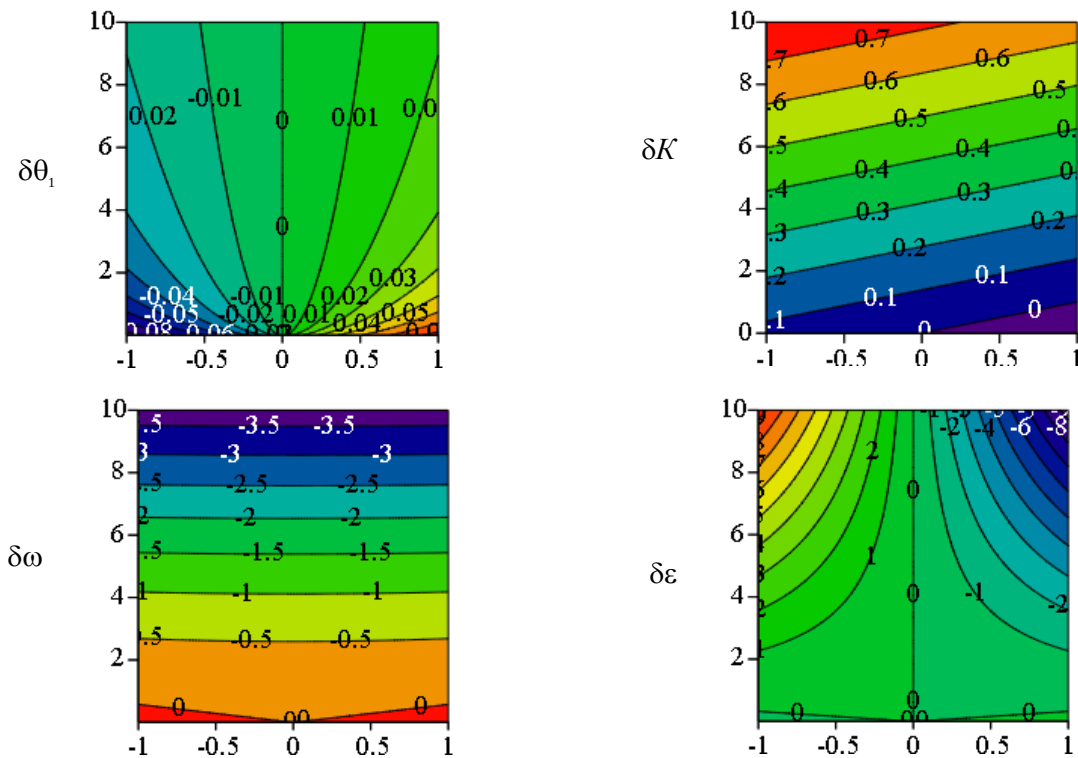


Рис. 3. Никель. Изолинии - на плоскости (r, k) - параметров начального состояния носика дендрита. Входные параметры: $\mu = 9,53 \text{ м/(К} \cdot \text{с)}$, $N = 5,3 \text{ м/с}$,

$$\alpha = 6.842 \cdot 10^5 (\text{К} \cdot \text{м})^{-1}, \varphi = 7.18 \cdot 10^4 \text{ с/м}^2, D_2^0 = -0,1, B_2^0 = 0,1$$

Расчеты выполнены при переохлаждении расплава $\Delta T = 166\text{K}$ при различающихся друг от друга начальных состояний носика (параметр D_2^0). Знак номера изолинии указывает направление эволюции возмущения. Структуры изолиний $\delta\omega = \text{const}$ и $\delta\varepsilon = \text{const}$ весьма чувствительно реагируют на изменение знака параметра D_2^0 .

Заключение

Изучено уравнение роста кристалла, содержащее информацию об отклонении температуры фазовой границы от ее равновесного значения и учитывающее неоднородность переохлаждения вдоль линии роста. Получены соотношения устойчивости начального состояния вершины дендрита, характеризующие взаимосвязь между режимом эволюции во времени линии роста и морфологическими свойствами возмущенной вершины. Вычислены скорости волн возмущения. Представлена структура изолиний параметров начального состояния носика дендрита.

Список литературы

1. Brener, E.A. Pattern selection in two-dimensional dendritic growth / E.A. Brener, V.I. Mel'nikov // *Advances in Physics*. – 1991. – Vol. 40. – №1. – P. 53-97.
2. Veenendaal, E. Simulation of crystal shape evolution in two dimensions / E. Veenendaal, A.J. Nijdam, J. Suchtelen // *Journal of Crystal Growth*. – 2002. – Vol. 235. – P. 603–618.
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. Glicksman, M.E. Capillary-mediated interface perturbations: Deterministic pattern formation / M.E. Glicksman // *Journal of Crystal Growth*. – 2016. – Vol. 450. – P. 119–139.
5. Шабловский, О.Н. Форма поверхности роста и предвестники ветвления дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль // *Успехи прикладной физики*. – 2018. – №4. – С. 316-324.
6. Шабловский, О.Н. Морфологические свойства линии роста двумерного дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский // *Прикладная физика*. – 2012. – №4. – С. 40–46.

ПЕРКОЛЯЦИОННЫЙ ПОРОГ В ОДНОМЕРНЫХ ЗАДАЧАХ СВЯЗЕЙ ПОДЧИНЯЕТСЯ НОРМАЛЬНОМУ ЗАКОНУ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Т.В.Якунина^{1,2}, В.Н.Удодов²

¹Сибирский федеральный университет Саяно-Шушенский филиал,
кафедра фундаментальной подготовки, tatav19@mail.ru

²Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова,
Инженерно-технологический институт, кафедра производственных технологий и
техноферной безопасности, кафедра программного обеспечения вычислительной
техники и автоматизированных систем udodov@khsu.ru

В последнее время нормальный закон распределения всё чаще появляется в поисковых системах сети Интернет. За эту весну и лето население России и мира благодаря СМИ получили представление о нормальном законе распределения благодаря пандемии COVID-19, которая охватила весь мир.

В наше время многие занимаются моделированием распространения лесного пожара или эпидемии в населённом пункте (городе) или в стране. Эти и многие другие вопросы поднимает теория перколяции (протекания) [1].

Она используется при описании упругости полимерных гелей, прыжковой проводимости в легированных полупроводниках при низких температурах и целом ряде других задач. Кроме того, появилось множество новых задач, которые охватывают ряд смежных областей, при решении которых используются перколяционные модели [1].

Решеточные модели теории перколяции в первую очередь представляют интерес с теоретической точки зрения, именно для них доказан ряд строгих утверждений и соотношений [1].

Более подробно остановимся на понятии перколяционного порога (порог протекания) (доля целых узлов, при которой исчезает соединяющий кластер) [1].

Функция распределения пороговых значений должна зависеть от числа узлов сетки N , с которой ведутся опыты. С увеличением числа узлов N функция распределения становится более острой, увеличивается максимальная высота кривых и уменьшается ширина. Это означает, что отклонение значения порога от среднего значения становится с ростом N всё менее и менее вероятным [1].

Расчеты на ЭВМ показали, что функция распределения порогов протекания является гауссовской кривой для трехмерного случая [1], а вид напоминает распределения для нормального закона. Следовательно, представляет интерес более подробное рассмотрение гипотез о нормальном законе распределения порога протекания, в том числе для одномерных задач.

Проверка гипотезы о предполагаемом законе неизвестного распределения производится так же, как и проверка гипотезы о параметрах распределения, т.е. при помощи специально подобранной случайной величины – критерия согласия [2].

Критерием согласия называют критерий проверки гипотезы о предполагаемом законе неизвестного распределения. Имеется несколько критериев согласия: χ^2 , Пирсона, Колмогорова, Смирнова и др. [2].

Рассмотрим критерий Пирсона к проверке гипотезы о нормальном распределении генеральной совокупности (критерий аналогично применяется и для других распределений, в этом состоит его достоинство) [1, 2]. С этой целью будем рассматривать эмпирические (наблюдаемые) и теоретические (вычисленные в предположении нормального распределения) частоты. Обычно эмпирические и теоретические частоты различаются. Возможно, что расхождение случайно (незначительно) и объясняется либо малым числом наблюдений, либо способом их группировки, либо другими причинами. Возможно, что расхождение частот неслучайно (значимо) и объясняется тем, что теоретические частоты вычислены исходя из неверной гипотезы о нормальном распределении генеральной совокупности [2].

Критерий Пирсона отвечает на поставленный выше вопрос. Правда, он не доказывает справедливость гипотезы, а лишь устанавливает на принятом уровне значимости её согласие или несогласие с данными наблюдений [2, 3].

Гипотеза: функция распределения порогов протекания для одномерных задач связей является гауссовской кривой, то есть подчиняется нормальному распределению.

Для изучения возьмем решётку с произвольным целым значением перколяционного радиуса (R) и количеством узлов в цепочке (N) в задаче связей и проведём исследование на ЭВМ [3].

Для расчёта гипотезы были взяты следующие параметры: $R = 3$, $N = 20$, число опытов $Q = 500$.

Проверим гипотезу $H_0 : X \sim N(\mu^{(500)}; \sigma^{(500)})$. Для этого нам необходимо найти выборочные характеристики [2].

- 1) Среднее выборочное $\overline{x_g} = 0,42$

- 2) Выборочная дисперсия $\overline{D_g} = 0,008$

- 3) Выборочное среднее квадратичное (стандартное) отклонение $\sigma_g = 0,09$

- 4) $\sigma^{(500)} = \sqrt{\frac{n \cdot D_g}{n-1}} = 0,09.$

Основанием для выдвижения гипотезы с оценками параметров $\mu^{(500)}$ и $\sigma^{(500)}$ служит вид графика (см. рис.), напоминающий вид кривой распределения для нормального закона.

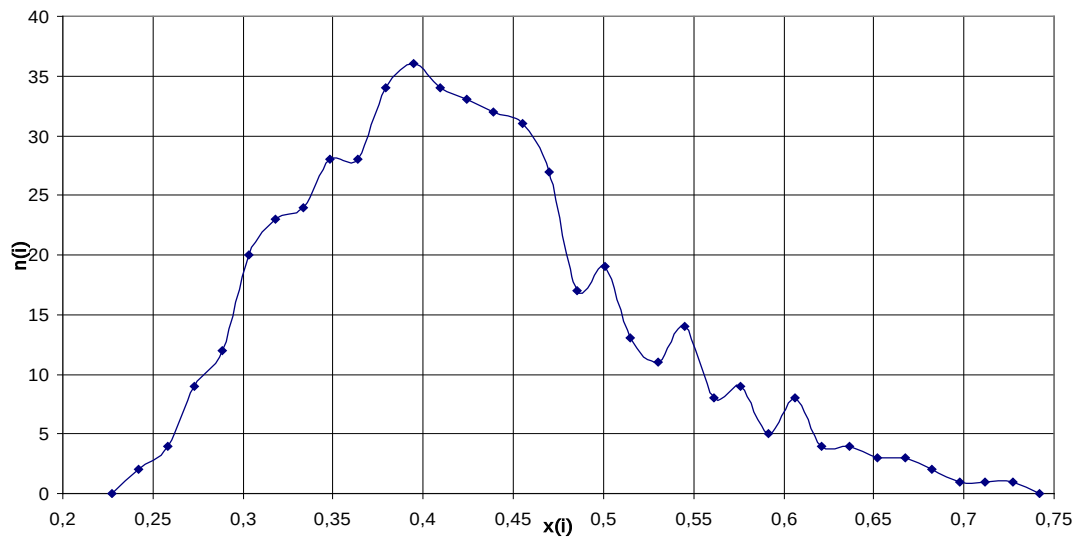


Рис. Полигон частот перколяционного порога в задаче связей $R = 3$, $N = 20$,
 $Q = 500$.

Приведем таблицу результатов расчетов.

Таблица

Расчетная таблица, по которой находят наблюдаемое значение критерия.

i	x_i	n_i	u_i	$\varphi(u_i)$	n'_i	$(n_i - n'_i)^2$	$(n_i - n'_i)^2 / n'_i$
1	0,242	2	-1,98	0,0562	4,5720	6,6154	1,4469
2	0,258	4	-1,81	0,0775	6,3049	5,3124	0,8426
3	0,273	9	-1,65	0,1023	8,3224	0,4591	0,0552
4	0,288	12	-1,48	0,1334	10,8525	1,3168	0,1213
5	0,303	20	-1,32	0,1669	13,5778	41,2443	3,0376
6	0,318	23	-1,16	0,2036	16,5635	41,4287	2,5012
7	0,333	24	-1,00	0,242	19,6874	18,5981	0,9447
8	0,348	28	-0,83	0,2827	22,9985	25,0148	1,0877
9	0,364	28	-0,66	0,3209	26,1062	3,5865	0,1374
10	0,379	34	-0,50	0,3521	28,6444	28,6822	1,0013
11	0,394	36	-0,33	0,3778	30,7352	27,7182	0,9018
12	0,409	34	-0,17	0,3932	31,9880	4,0480	0,1265
13	0,424	33	-0,01	0,3989	32,4517	0,3006	0,0093
14	0,439	32	0,15	0,3945	32,0938	0,0088	0,0003
15	0,455	31	0,33	0,3778	30,7352	0,0701	0,0023
16	0,470	27	0,49	0,3538	28,7827	3,1781	0,1104

17	0,485	17	0,65	0,323	26,2770	86,0636	3,2752
18	0,500	19	0,82	0,285	23,1856	17,5195	0,7556
19	0,515	13	0,98	0,2468	20,0779	50,0972	2,4951
20	0,530	11	1,14	0,2083	16,9458	35,3531	2,0862
21	0,545	14	1,30	0,1714	13,9439	0,0031	0,0002
22	0,561	8	1,48	0,1334	10,8525	8,1368	0,7498
23	0,576	9	1,64	0,104	8,4607	0,2908	0,0344
24	0,591	5	1,80	0,079	6,4269	2,0360	0,3168
25	0,606	8	1,97	0,0573	4,6615	11,1454	2,3909
26	0,621	4	2,13	0,0413	3,3599	0,4098	0,1220
27	0,636	4	2,29	0,029	2,3592	2,6921	1,1411
28	0,652	3	2,46	0,0194	1,5782	2,0214	1,2808
29	0,667	3	2,63	0,0126	1,0250	3,9004	3,8051
30	0,682	2	2,79	0,0081	0,6590	1,7984	2,7291
31	0,697	1	2,96	0,005	0,4068	0,3519	0,8652
32	0,712	1	3,11	0,0032	0,2603	0,5471	2,1016
33	0,727	1	3,28	0,0018	0,1464	0,7286	4,9754
Сумма		500					41,4510

$\alpha = 0,05$ - уровень значимости, это значение показывает вероятность отвергнуть гипотезу [2].

$k = s - 3 = 33 - 3 = 30$ - число степеней свободы

Таким образом, $\chi^2_{набл} = 41,4510$, а $\chi^2_{кр.}(0,05;30) = 43,8$

Так как $\chi^2_{набл} < \chi^2_{кр}$, то гипотезу нормального распределения нет основания отвергнуть.

Кроме того, так же были проверены подобные гипотезы с другими параметрами в одномерных задачах узлов. Во всех случаях гипотеза о нормальном законе распределения подтверждалась.

Результаты исследования:

- Для $N = 10, R = 2, Q = 100$ в результате вычислений получаем, что $\chi^2_{набл.} = 4,379$. Эта величина меньше $\chi^2_{кр.}(0,05; 2) = 6$.
- Для $N = 20, R = 3, Q = 200$ в результате вычислений получаем, что $\chi^2_{набл.} = 3,818$. Эта величина существенно меньше $\chi^2_{кр.}(0,05; 8) = 15,5$.

Гипотеза о нормальном законе распределения порога протекания по ближайшим соседям подтверждена. Таким образом, показано, что перколяционный порог в одномерных решётках в задачах связей протекания, с произвольными радиусом перколяции R и количеством узлов N , подчиняется нормальному закону распределения. Точнее, вероятность отвергнуть эту гипотезу менее 5%.

Список литературы

1. Эфрос А.Л. Физика и геометрия беспорядка / А.Л.Эфрос. — М.: Наука, 1982. — 176 с.
2. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика: учеб. Пособие для вузов / В.Е. Гмурман. — 6-е изд., стер. — М.: Высшая школа, 1998. — 479 с.
3. Андросик А.Б. Информационные технологии: приоритетные направления развития: монография / А.Б. Андросик, Б.А.Борисов, Т.В. Волкова и др. / Под общ. ред. С.С. Чернова. — Книга 9. — Новосибирск: ООО агентство «СИБПРИНТ», — 2013. — Книга 9. — № 2. С.86 – 102.

СПИСОК ДОКЛАДОВ

С.С. Анцыферов, К.Н. Фазилова МЕТОД КОНТРОЛЯ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ КОГНИТИВНЫХ СИСТЕМ В РЕЖИМЕ НЕРАВНОВЕСНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ	3
Н.М. Богатов, Л.Р. Григорьян, А.В. Кленевский, М.С. Коваленко ОБРАЗОВАНИЕ ПЕРВИЧНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ ЭЛЕКТРОНАМИ В НЕРАВНОВЕСНОЙ КРЕМНИЕВОЙ СТРУКТУРЕ	7
Н.М. Бодунов, В.И.Халиулин СКОБКА ПУАССОНА И ИНТЕГРАЛЫ ДВИЖЕНИЯ В ЗАДАЧЕ ОБТЕКАНИЯ ПРОИЗВОЛЬНОГО ПЛОСКОГО КОНТУРА ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТЬЮ	14
Р.Н.Голых ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ ИМПУЛЬСНОГО РЕЖИМА УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ЖИДКОСТЬ ДЛЯ УМЕНЬШЕНИЯ КАВИТАЦИИ	18
И.К. Горбань, М.Ю. Сенашова, М.Г. Садовский СТРУКТУРА НЕКОДИРУЮЩИХ ОБЛАСТЕЙ ГЕНОМОВ ХЛОРОПЛАСТОВ	24
Е.А. Горбунова, Н.Н. Медведева, М.Г. Садовский, Р.А. Зуков ВЗАИМОСВЯЗЬ АНТРОПОМЕТРИЧЕСКИХ И БИОИМПЕДАНСОМЕТРИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ФИЗИЧЕСКОГО РАЗВИТИЯ С ПОСЛЕОПЕРАЦИОННЫМИ ОСЛОЖНЕНИЯМИ У БОЛЬНЫХ РАКОМ ЖЕЛУДКА	31
А.Ю. Дорогов МОДЕЛИРОВАНИЕ УСЛОВИЙ СВЯЗИ ДЛЯ СЕТЕЙ ПЕРЕДАЧИ ДАННЫХ КВ-ДИАПАЗОНА	40
А.Ю. Дорогов ПРОГРАММНАЯ МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ ВОЛНОВОГО РАСПИСАНИЯ РАДИОЛИНИЙ КВ-СЕТИ	46
Е.А.Ефимов ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ВОЗДЕЙСТВИЯ ИМПУЛЬСНОГО СЕЙСМОИСТОЧНИКА НА ГРУНТ С УЧЁТОМ ДИССИПАТИВНЫХ СВОЙСТВ ПРИМЕНЯЕМЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ	51
Б.М. Каганович, В.А. Стенников, М.С. Зароднюк, Е.А. Барахтенко МНОГОЭЛЕМЕНТНЫЙ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЦЕПНЫХ МОДЕЛЕЙ	55

Е.С. Калинин ВЛИЯНИЕ ИСХОДНЫХ ДАННЫХ НА ВЫБОР «НАИХУДШИХ» СЦЕНАРИЕВ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ РАСЧЕТОВ ПО ОЦЕНКЕ ПОЖАРНОГО РИСКА	60
A.I. Krom, M.I. Medvedeva, I.I. Ryzhkov MATHEMATICAL MODELLING OF IONIC CONDUCTIVITY IN NANOPOROUS MEMBRANES WITH CONSTANT SURFACE POTENTIAL	63
В.А.Моисейченко ВЛИЯНИЕ ОБЪЁМНО-ПЛАНИРОВОЧНОГО РЕШЕНИЯ СТАДИОНА НА ДИНАМИКУ ДВИЖЕНИЯ ЛЮДЕЙ	68
О.А. Мутовина, М.Г. Садовский К ВОПРОСУ О РАСПРОСТРАНЁННОСТИ ТРАНСПОЗОНОВ В ГЕНОМАХ ХЛОРОПЛАСТОВ НЕКОТОРЫХ РАСТЕНИЙ	72
А.Л.Осипов, В.П.Трушина ПРОГНОЗИРОВАНИЕ НАЛОГОВЫХ ПОСТУПЛЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ	77
I.I. Ryzhkov, S.V. Kozlova, I.V. Stepanova, D.V. Guzei THEORY OF SWITCHABLE ION TRANSPORT IN MEMBRANES WITH ELECTRICALLY CONDUCTIVE SURFACE	82
Садовский М.Г., Феллер А.А., Мартынова Е.А., Черняев Д.В., Семёнов Э.В., Слепов Е.В., Зуков Р.А. СТРАТИФИКАЦИЯ БОЛЬНЫХ С РАЗНЫМ ТИПОМ ОПУХОЛЕЙ НА ОСНОВАНИИ ДАННЫХ РАЗВЕРНУТОГО АНАЛИЗА КРОВИ	87
С.А.Тычинина МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРАВЛЕНИЯ ЭВАКУАЦИЕЙ ПРИ ПОЖАРЕ ИЗ ЗДАНИЯ СРЕДНЕЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ШКОЛЫ	100
К.О. Туценко, А.А. Хорошавина, В.А. Абрамов, Е.А. Карлова, М.Г. Садовский О НЕКОТОРЫХ ОСОБЕННОСТЯХ ДИАГНОСТИКИ БОЛЕЗНИ ПАРКИНСОНА ПО ДАННЫМ ПОЗИТРОННО-ЭМИССИОННОЙ ТОМОГРАФИИ С ¹⁸ F-ДОПА	103
В.Н. Удодов ЭПСИЛОН-РАЗЛОЖЕНИЕ ПРИ КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ, РАВНОЙ НУЛЮ	111
А.А. Хорошавина, К.О. Туценко, В.А. Абрамов, М.Е. Туник, Д.В. Похабов, М.Г. Садовский	

ТРЕМОР И ОЛЬФАКТОМЕТРИЯ КАК ИНСТРУМЕНТЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ БОЛЕЗНИ ПАРКИНСОНА И ЭССЕНЦИАЛЬНОГО ТРЕМОРА	118
О. Н. Шабловский, Д. Г. Кроль УСТОЙЧИВОСТЬ НАЧАЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ ВЕРШИНЫ ДЕНДРИТА ПРИ РОСТЕ КРИСТАЛЛА ИЗ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА	125
Т.В.Якунина, В.Н.Удодов ПЕРКОЛЯЦИОННЫЙ ПОРОГ В ОДНОМЕРНЫХ ЗАДАЧАХ СВЯЗЕЙ ПОДЧИНЯЕТСЯ НОРМАЛЬНОМУ ЗАКОНУ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ	131

АЛФАВИТНЫЙ СПИСОК УЧАСТНИКОВ СЕМИНАРА

Участник	Адрес	Стр.
Абрамов Владислав Геннадьевич	660037, Красноярск, Коломенская ул., 26 к.2, ФГБУ «Федеральный Сибирский научно-клинический центр Федерального медико-биологического агентства России» E-mail: excalibr@mail.ru	103, 118
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	3
Барахтенко Евгений Алексеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А.Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: barakhtenko@isem.irk.ru	55
Богатов Николай Маркович	350040, г. Краснодар, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», т. 8(861)2199501*266 E-mail: bogatov@phys.kubsu.ru	7
Бодунов Николай Михайлович	420111, г. Казань, ул.К.Маркса, д.10, КГТУ-КАИ, кафедра ПЛА, (843) 236-52-42, 231-03-25, 231-03-16 E-mail: bodunov_nm@mail.ru	14
Голых Роман Николаевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: romangl90@gmail.com	18
Горбань Инна Константиновна	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: inn.gorban@gmail.com	24
Горбунова Екатерина Александровна	660133, Красноярск, ул. 1-я Смоленская, 16, Красноярский краевой клинический онкологический диспансер им. А.И. Крыжановского, Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого E-mail: opium-100@yandex	31
Григорьян Леонтий Рустемович	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: leonmezon@mail.ru	7
Гузей Дмитрий Викторович	Сибирский Федеральный Университет E-mail: gudimas@yandex.ru	82
Дорогов Александр Юрьевич	197376, Санкт-Петербург, ул. проф. Попова д. 5, Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет "ЛЭТИ" E-mail: vaksa2006@yandex.ru	40, 46
Ефимов Евгений Александрович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: eugene6467@mail.ru	51

Зароднюк Максим Сергеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А.Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: max@isem.irk.ru	55
Зуков Руслан Александрович	660022, Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России, Красноярский краевой клинический онкологический диспансер им. А.И. Крыжановского E-mail: zukov_rus@mail.ru	31, 87
Каганович Борис Моисеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: thermo@isem.irk.ru	55
Калинин Егор Сергеевич	60036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: kalinin009_1995@mail.ru	60
Карлова Елена Анатольевна	660037, Красноярск, Коломенская ул., 26 к.2, ФГБУ «Федеральный Сибирский научно-клинический центр Федерального медико-биологического агентства России» E-mail: elenakarlova67@gmail.com	103
Кленевский Александр Викторович	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: physinf@phys.kubsu.ru	7
Коваленко Максим Сергеевич	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: m.s.kovalenko@ya.ru	7
Козлова Софья Владимировна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: sonique@icm.krasn.ru	82
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	125
Кром Артур Игоревич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: kai@icm.krasn.ru	63
Мартынова Елена Андреевна	660022, Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, Красноярский государственный медицинский университет им. В.Ф.Войно-Ясенецкого Минздрава РФ E-mail: Martynova_Alena@inbox.ru	87
Медведева Мария Ивановна	660074, г. Красноярск, ул. Киренского 26, Институт космических и информационных технологий СФУ E-mail: mimedvedeva@rambler.ru	63

Медведева Надежда Николаевна	660022, Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России E-mail: medvenad@mail.ru	31
Моисейченко Вячеслав Александрович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: slava.250894@gmail.com	68
Мутовина Ольга Александровна	660041, Красноярск, Свободный пр., 82А, Сибирский федеральный университет, Институт фундаментальной биологии и биотехнологии E-mail: mutovina.ole4ka@mail.ru	72
Осипов Александр Леонидович	630099, Новосибирск, ул. Каменская, 56, Новосибирский государственный университет экономики и управления E-mail: alosip@mail.ru	77
Похабов Дмитрий Владимирович	660022, Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России, Федеральное государственное бюджетное учреждение «Федеральный Сибирский научно-клинический центр Федерального медико- биологического агентства» E-mail: neurodmit@mail.ru	118
Рыжков Илья Игоревич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: rii@icm.krasn.ru	63, 82
Садовский Михаил Георгиевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: msad@icm.krasn.ru	24, 31, 72, 87, 103, 118
Семенов Эдуард Васильевич	Федеральное государственное бюджетное учреждение «Федеральный Сибирский научно- клинический центр Федерального медико- биологического агентства» E-mail: semenov_krasgmu@mail.ru	87
Сенашова Мария Юрьевна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: msen@icm.krasn.ru	24
Слепов Евгений Владимирович	Федеральное государственное бюджетное учреждение «Федеральный Сибирский научно- клинический центр Федерального медико- биологического агентства» E-mail: slepov99@mail.ru	87
Стенников Валерий Алексеевич	64033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: sva@isem.irk.ru	55

Степанова Ирина Владимировна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: stepiv@icm.krasn.ru	82
Трушина Вероника Павловна	630099, Новосибирск, ул. Каменская, 56, Новосибирский государственный университет экономики и управления E-mail: veronika07-92@mail.ru	77
Туник Мария Евгеньевна	Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России E-mail: tsuprikova.mary.maria@yandex.ru	118
Туценко Ксения Олеговна	660022, Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России E-mail: kseniamkib@gmail.com	103, 118
Тычина София Андреевна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: Zagarskikh.sofia@mail.ru	100
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	111, 131
Фазилова Ксения Наильевна	119454, ЦФО, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 78, МИРЭА – Российский технологический университет, Физико-технологический институт E-mail: fazilova@mirea.ru	3
Феллер Алёна Александровна	660022, Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, Красноярский государственный медицинский университет им. В.Ф.Войно-Ясенецкого Минздрава РФ E-mail: felleraa96@mail.ru	87
Халиулин Валентин Илдарович	420111, г.Казань, ул.К.Маркса, д.10, Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н.Туполева (КНИТУ-КАИ) E-mail: pla.kai@mail.ru	14
Хорошавина Алина Алексеевна	660022, Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, Красноярский государственный медицинский университет им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России E-mail: horoshavina-lina-yan@ya.ru	103, 118
Черняев Денис Владимирович	Федеральное государственное бюджетное учреждение «Федеральный Сибирский научно-клинический центр Федерального медико-биологического агентства» E-mail: denisonco@mail.ru	87

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	125
Якунина Татьяна Валерьевна	655619, Респ. Хакасия, Черемушки, д. 46, Саяно- Шушенский филиал СФУ E-mail: Tatav19@mail.ru	131

Научное издание

Моделирование неравновесных систем—2020

Материалы XXIII Всероссийского семинара 2 – 4 октября 2020 г.

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

Подписано в печать «6» сентября 2020 г. Формат 60 × 90/8. (А4)
Бумага офсетная. Печать плоская.
Усл. печ. л. 13,56. Уч.-изд. л. 11,81.
Тираж 500 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