

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
НЕРАВНОВЕСНЫХ,
АДАПТИВНЫХ И
УПРАВЛЯЕМЫХ
СИСТЕМ – 2022**

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

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ, АДАПТИВНЫХ И УПРАВЛЯЕМЫХ СИСТЕМ-2022

МАТЕРИАЛЫ
ДВАДЦАТЬ ПЯТОГО ВСЕРОССИЙСКОГО СЕМИНАРА
7 – 9 октября 2022 года

Красноярск 2022

УДК 001.126 (571.51) (043)

М 74

Моделирование неравновесных, адаптивных и управляемых систем:
Материалы XXV Всероссийского семинара, / Под ред. М.Г. Садовского; отв. за
вып. М.Ю. Сенашова; – Красноярск: Институт вычислительного моделирования
Сибирского отделения Российской академии наук, 2022. –189 с.

*В сборнике представлены материалы XXV Всероссийского семинара
«Моделирование неравновесных, адаптивных и управляемых систем» (МНАУС–2022),
проходившего в городе Красноярске 7–9 октября 2022 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 № 075-02-2022-873).**

Редакционная коллегия:

Садовский Михаил Георгиевич – ответственный редактор

Сенашова Мария Юрьевна – ответственный за выпуск

© ИВМ СО РАН, 2022

© Коллектив авторов, 2022

ISBN 978-5-6047078-1-4



9 785604 707814

КОГНИТИВНЫЙ ПОДХОД К УПРАВЛЕНИЮ СИСТЕМАМИ КАЛИБРОВКИ ЭТАЛОННЫХ МЕР НАНОМЕТРИИ

С.С. Анцыферов, В.Г. Маслов, К.Н. Фазилова

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

fazilova@mirea.ru

Введение

Для наблюдения и измерения параметров наноструктурированных объектов широко используются системы нанометрии. В силу этого, они нуждаются в соответствующем метрологическом обеспечении и, прежде всего, в методах и технических средствах калибровки эталонных мер. Следует отметить, что процесс функционирования систем калибровки эталонных мер нанометрии нуждается в управлении, что гарантирует, в свою очередь, достижение необходимых показателей точности.

Управление функционированием связано, согласно ранее разработанной методологии [1-2], с выполнением таких операций, как установление диапазона допустимых значений вероятностей эффективности функционирования структурных элементов (СЭ) системы, построение фазовой диаграммы функционирования системы и определение допустимых границ области функционирования.

По положению точек в фазовом пространстве может осуществляться управление функционированием системы. В случае «выхода» той или иной точки за пределы установленных границ области принимаются соответствующие решения о коррекции тех или иных параметров системы калибровки.

Цель работы – разработка методики управления системами калибровки эталонных мер нанометрии.

Методика управления системами калибровки эталонных мер нанометрии

Методика управления системой калибровки эталонных мер нанометрии включает в себя алгоритмы построения границ области функционирования и оценки реального состояния системы [2]. Алгоритм построения границ области функционирования предполагает выполнение таких операций как установление интервала допустимых вероятностей эффективности функционирования СЭ, построение функциональных зависимостей для заданных значений вероятностей и для установленного числа СЭ, построение фазовой диаграммы, описывающей состояние системы.

Алгоритм оценки реального состояния системы состоит в определении текущих значений вероятностных оценок эффективности СЭ и соответствующих значений H , $\dot{H}$ (точка состояния системы). В случае «выхода» точки за пределы установленных граничных значений области функционирования поступает сигнал на блок принятия решений и, в случае необходимости, осуществляется необходимая трансформация системы.

Практическое применение разработанной методики

Система калибровки эталонных мер нанометрии представляет собой совокупность взаимосвязанных технологических операций (ТОп) (рис. 1).

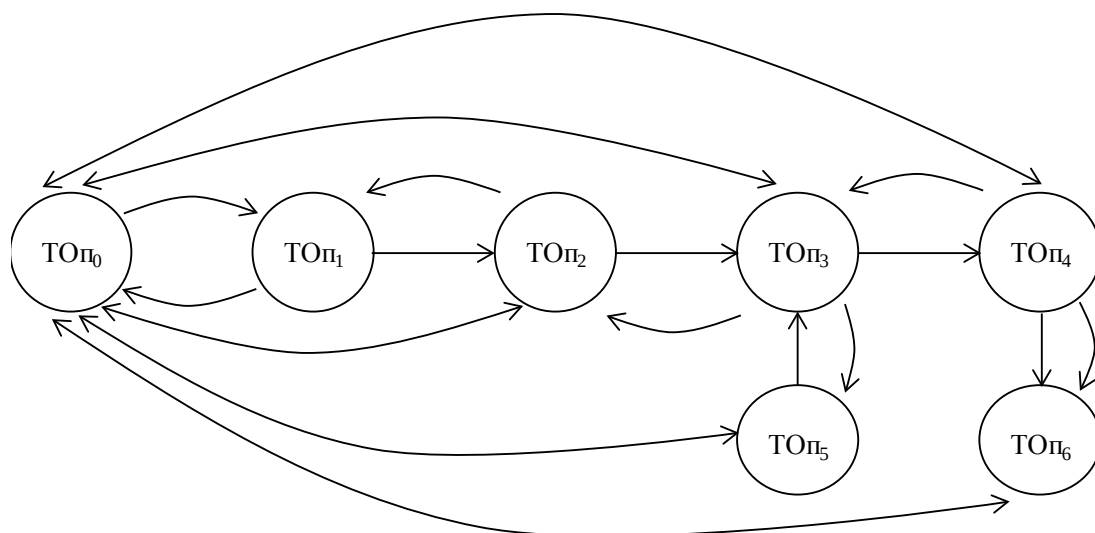


Рис. 1. Структурная схема системы калибровки эталонных мер нанометрии.

Функции ТОп:

ТОп₀ – контроль качества функционирования системы управления калибровкой эталонных мер нанометрии.

ТОп₁ – измерение исходной высоты рельефных элементов поверхности меры.

ТОп₂ – измерение высоты эталонных мер путем компарирования с помощью стилусного профилометра Alpha-Step D-600 (рис. 2).

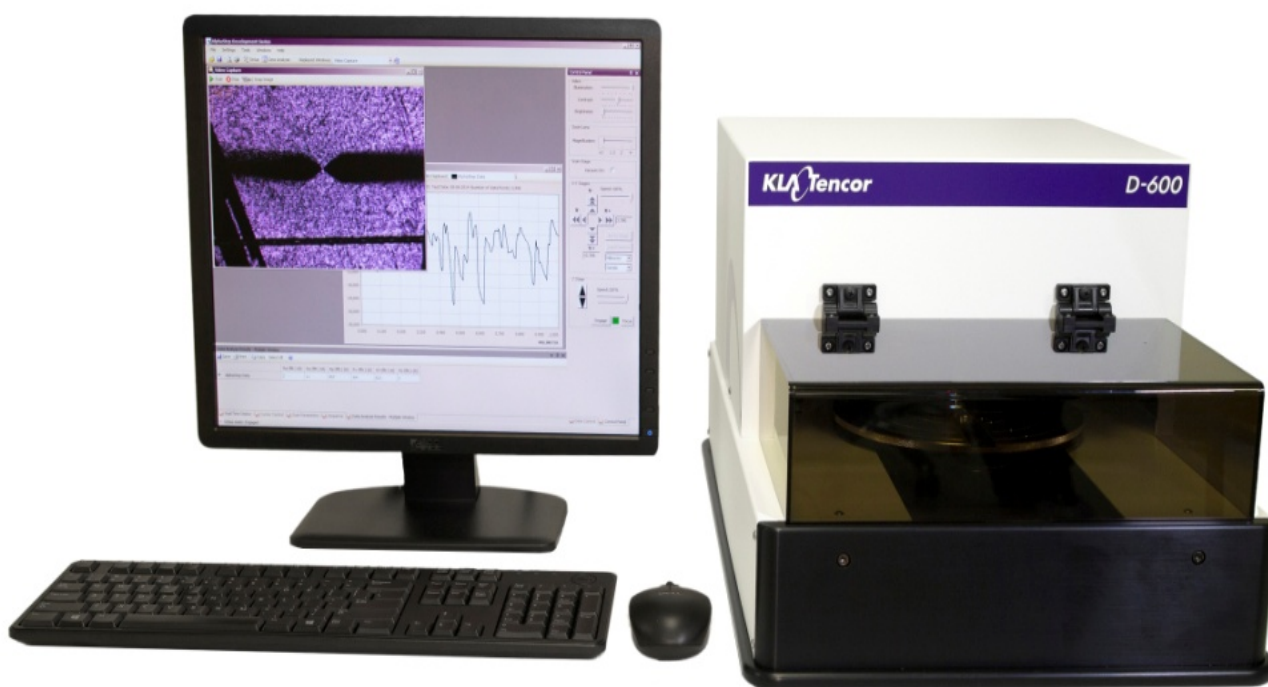


Рис. 2. Общий вид AlphaStep D-600.

ТОп₃ – оценка шероховатости.

ТОп₄ – магнетронное напыление пленок на поверхность меры по всей площади (рис. 3).

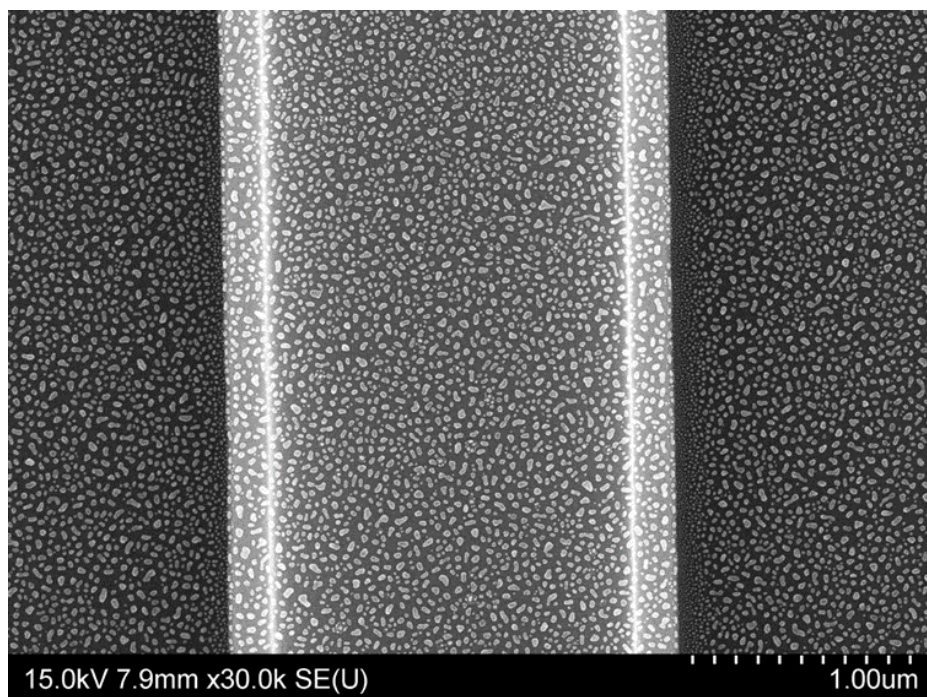


Рис. 3. Изображение в РЭМ ступени меры после магнетронного напыления.

ТОП₅ – измерение высоты установленных участков меры после магнетронного напыления (рис. 4).

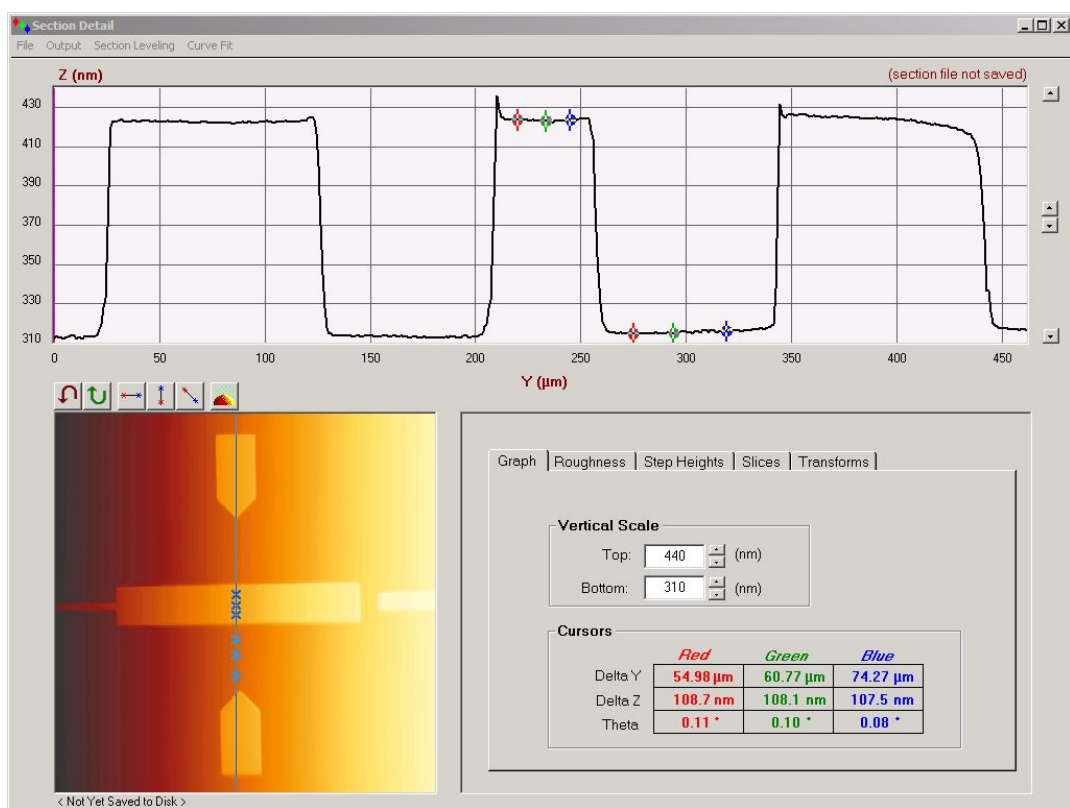


Рис. 4. Профиль и топология фрагмента поверхности меры, полученные с помощью интерферометра MicroXAM-100, после напыления пленки Cr.

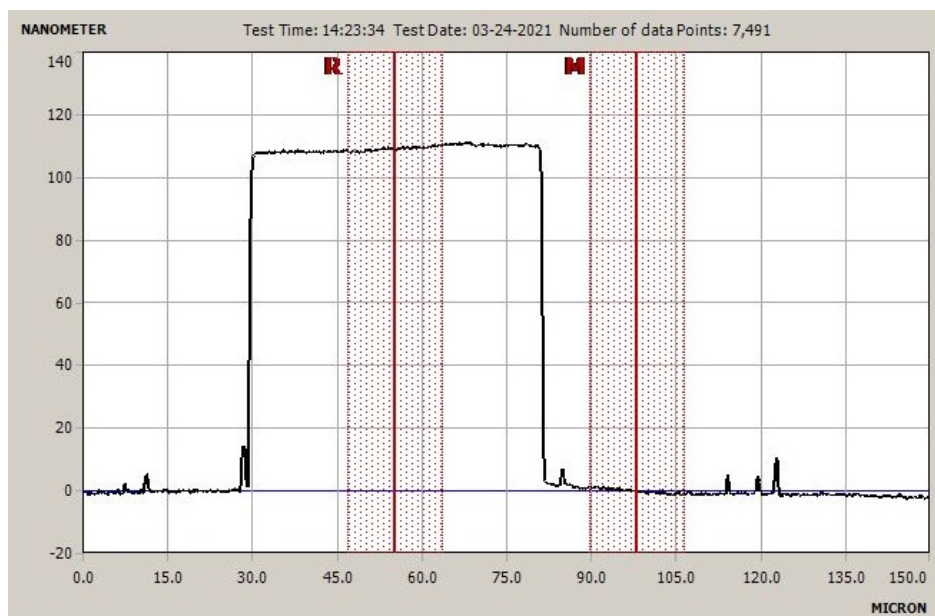


Рис. 5. Профиль фрагмента поверхности меры, полученный с помощью стилусного профилометра D-600, после напыления пленки Cr.

ТОП₆ – измерение высоты эталонной меры методом трехмерной реконструкции в растровом электронном микроскопе.

Согласно разработанной методике, при построении области функционирования системы (рис. 6), параметры задавались исходя из достижения точности измерения высоты эталонной меры методами интерферометрии (± 2 нм).

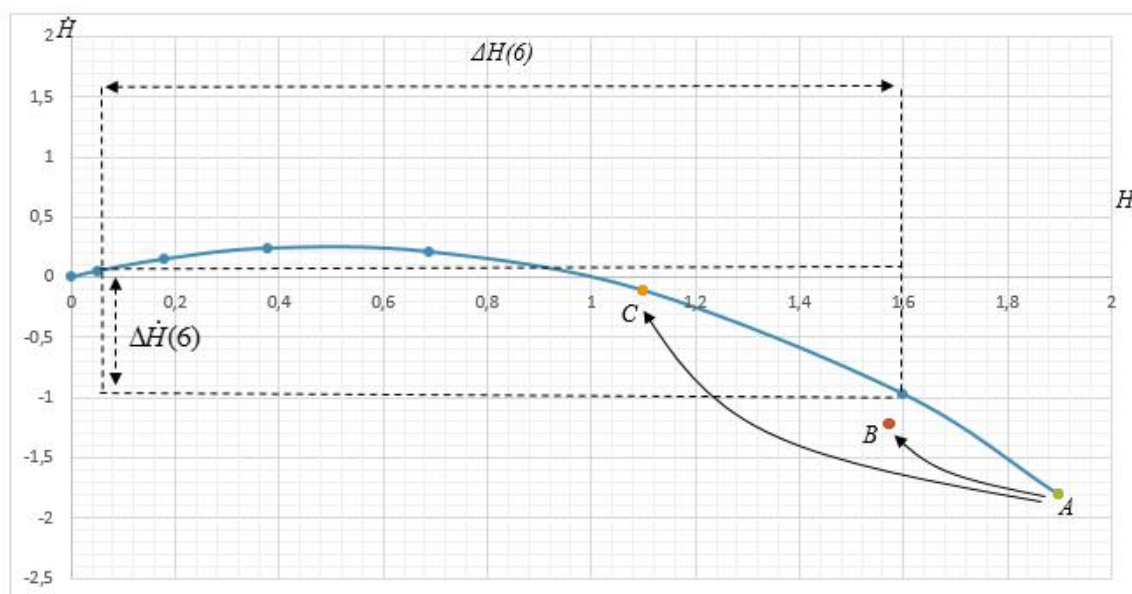


Рис. 6. Управление системой калибровки.

На рисунке 6:

* точка *A* – начальный этап процесса калибровки (точность определения высоты меры равна ± 10 нм);

* точки *B* и *C* – результат корректировки технологического процесса путем магнетронного напыления на поверхность меры частиц золота (точка *B*) и хрома (точка *C*). Достигнутые при этом точности измерения высоты ± 7 нм и $\pm 3,2$ нм, соответственно.

Выводы

В результате использования методики управления системой калибровки эталонных мер нанометрии обеспечило возможность достижения точности измерения высоты эталонной меры сопоставимой с точностью метода интерферометрии с помощью более простых, менее затратных технических средств.

Список литературы

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

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

ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НЕГЕНОМНОЙ ВАРИАБЕЛЬНОСТИ КЛЕТОК ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ БАКТЕРИЙ

С.И.Барцев^{1,2}

¹Институт биофизики СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, *BartsevSI@ibp.ru*,

²Сибирский федеральный университет

Гетерогенность в изогенных популяциях бактерий или, по-другому, негеномная вариативность клеток все больше привлекает внимание исследователей. Отчасти это обусловлено развитием методов отслеживания характеристик отдельной клетки вплоть до динамики синтеза белка в ходе клеточного цикла [1, 2]. С другой стороны, понимание механизмов или причин фенотипического различия клеток в изогенной популяции и оценка этих различий важны, как для формирования фундаментальных представлений об организации внутриклеточных процессов, так и для повышения эффективности решения практических задач медицины и биотехнологии.

Основным инструментом отслеживания белкового синтеза в масштабах одной клетки является флуоресцентная микроскопия. Однако отмечается, что при современных уровнях чувствительности приборов стимулирующее излучение оказывает негативное влияние на физиологическое состояние клетки [2]. Уникальной альтернативой флуоресцентной микроскопии является использование люминесценции светящихся бактерий [3] в качестве канала информации о состоянии внутриклеточного метаболизма. Уникальность люминесценции состоит в том, что клетка излучает, находясь в нативном состоянии, что существенно понижает возникновение каких-либо артефактов.

При росте на богатых средах интенсивность свечения отдельных клеток яркосветящихся штаммов люминесцентных бактерий *Photobacterium leiognathi* и *Photobacterium phosphoreum* достигает 10^4 - 10^5 квантов/с. Такой сигнал может быть зарегистрирован с помощью чувствительной фотометрической аппаратуры. Не погружаясь в детали устройства экспериментальной установки для регистрации сверхслабых свечений, работающей в режиме счета фотонов, и методику снятия

распределений бактериальных клеток по интенсивности свечения [4], перейдем к описанию результатов. Отметим только, что все эксперименты проводились с бактериальными клонами, т.е. генетически однородными популяциями. Типичный вид распределений светящихся бактерий на различных стадиях развития накопительной культуры бактерий в жидкой среде показан на Рис.1.

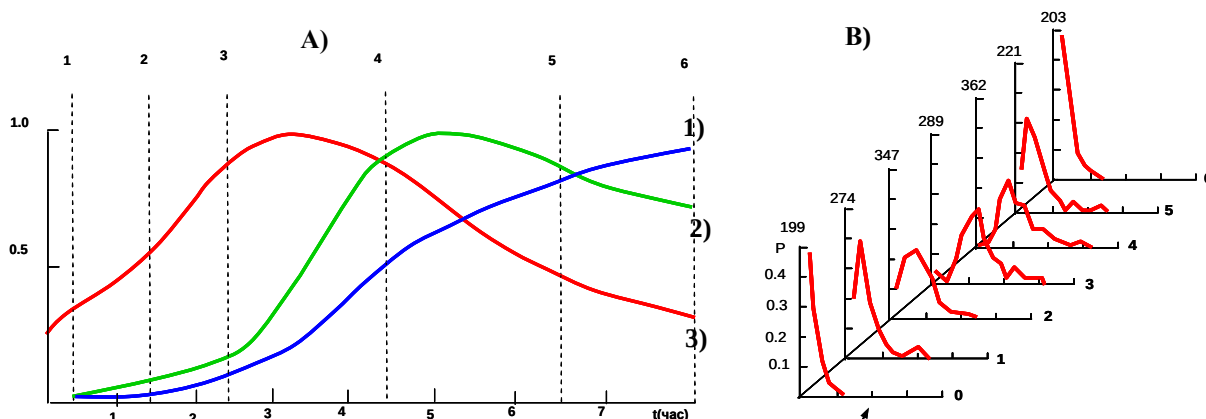


Рис.1 Динамика параметров культуры люминесцентных бактерий (А) и распределений клеток по интенсивности свечения (В). Кривые параметров культуры приведены в относительных единицах: 1 – оптическая плотность; 2 – интенсивность свечения культуры; 3 – средняя интенсивность свечения отдельной клетки. Пунктирные линии указывают моменты взятия проб, а номера соответствуют номерам соответствующих распределений.

Сразу возникает вопрос о возможном механизме наблюдаемой вариации фенотипического признака. Самое простое объяснение наблюдаемой вариативности напрашивается сразу – интенсивность свечения определяется вариативностью объемов бактериальной клетки. Однако прямые измерения вариации объема клеток *B. subtilis* and *E. coli* показали, что коэффициент вариации (CV) объема клеток составляет ~23% [5], в то время как средний CV интенсивности свечения бактерий ~50% и может превышать 70%. Следовательно, существует дополнительный фактор, обеспечивающий существенную вариативность свечения клеток.

Интенсивность свечения бактериальной клетки в нормальных условиях роста определяется количеством в ней люциферазы – фермента, катализирующего люминесцентную реакцию. Возможные механизмы

вариативности количества белка в клетке обсуждаются в ряде работ [5-9]. В основном оценивается вклад неравномерного распределения белка, мРНК и рибосом при делении, вариативность количества мРНК, вследствие малого числа молекул, переход генов из активного в пассивное состояния вследствие обратимого связывания транскрипционного фактора, конформация молекулы ДНК, предотвращающая связывание РНК-полимеразы и др.

При большом числе молекул, что имеет место для люциферазы, флуктуации ее количества между дочерними клетками определяется флуктуацией неравномерности объемов дочерних клеток, что не в состоянии объяснить наблюдаемую величину CV. В то же время показано [10], что белки с сильной экспрессией имеют коэффициент вариации $\sim 30\%$, что указывает на «внешний», не связанный с флуктуациями малого количества молекул, фактор.

Не вникая в детали процессов транскрипции и трансляции рассмотрим возможный феноменологический стохастический механизм порождения значительной вариативности количества люциферазы в клетках.

Количество люциферазы в клетке возраста τ — $z(\tau)$ складывается из количества люциферазы, полученного клеткой после деления (x), и количества люциферазы, наработанного к возрасту $\tau - y(\tau)$:

$$z(\tau) = x + y(\tau)$$

Сразу после деления, когда $\tau = 0$, клетка содержит только люциферазу, наработанную в предыдущем клеточном цикле. Пусть $f(x)$ — распределение клеток узкого возрастного интервала по количеству люциферазы, полученной при делении, не меняется на всем протяжении клеточного цикла. Вид этого распределения не известен и должен быть получен решением модельного уравнения.

Вид распределения клеток узкого возрастного интервала по количеству люциферазы, наработанной к возрасту τ — $P(y, \tau)$ можно получить из следующих соображений. Для простоты предположим, что синтез люциферазы начинается сразу после деления клетки, тесно связанным с освобождением ДНК от всех транскрипционных факторов (в нашем случае репрессора люциферазного гена),

идет с постоянной скоростью и прекращается после связывания репрессора с оператором.

Путь τ' – момент связывания репрессора с оператором. Тогда количество наработанной к моменту времени τ люциферазы определяется следующим выражением:

$$y(\tau) = \alpha \int_0^{\tau} \theta(\tau' - \eta) d\eta$$

где α - скорость синтеза фермента; θ - ступенчатая функция Хевисайда.

Поскольку $y(\tau)$ есть также функция случайной величины τ' , распределение $P(y, \tau)$ описывается следующим выражением:

$$P(y, \tau) = \int_0^{\infty} g(\tau') \delta[y - \alpha \int_0^{\tau} \theta(\tau' - \eta) d\eta] d\tau'$$

где $g(\tau')$ – распределение, описывающее долю популяции клеток, в которой связывание репрессора с оператором произошло в интервале $[\tau', \tau' + d\tau']$; $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака.

Этот интеграл разбивается на два с пределами интегрирования $[0, \tau)$ и $[\tau, \infty)$, причем клетки, в которых связывание репрессора с оператором произошло к возрасту τ ($\tau' < \tau$), попадают в первый интеграл, остальные ($\tau' \geq \tau$) – во второй. Проведем серию выкладок:

$$\begin{aligned} P(y, \tau) &= \int_0^{\tau} g(\tau') \delta(y - \alpha \int_0^{\tau'} d\eta) d\tau' + \int_{\tau}^{\infty} g(\tau') \delta(y - \alpha \int_0^{\tau} d\eta) d\tau' \\ P(y, \tau) &= \int_0^{\tau} g(\tau') \delta(y - \alpha \tau') d\tau' + \delta(y - \alpha \tau) \int_{\tau}^{\infty} g(\tau') d\tau' \\ P(y, \tau) &= \frac{1}{\alpha} g\left(\frac{y}{\alpha}\right) \theta(\alpha \tau - y) + \delta(y - \alpha \tau) \int_{\tau}^{\infty} g(\tau') d\tau' \end{aligned}$$

Поскольку общее количество люциферазы в клетке ($z(\tau)$) представляет собой сумму независимых случайных переменных величин x и y , то распределение клеток в узком временном интервале возраста τ по общему количеству люциферазы имеет вид:

$$L(z, \tau) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} f(x) P(y, \tau) \delta(z - x - y) dx dy$$

$$L(z, \tau) = \int_0^{\infty} f(z - y)P(y, \tau)dy$$

$$L(z, \tau) = \int_0^{\infty} f(z - y) \frac{1}{\alpha} g\left(\frac{y}{\alpha}\right) \theta\left(\tau - \frac{y}{\alpha}\right) dy + \int_0^{\infty} f(z - y) \delta(y - \alpha\tau) \int_{\tau}^{\infty} g(\tau') d\tau' dy$$

Произведя замену переменных $\tau' = y/\alpha$ получим:

$$L(z, \tau) = \int_0^{\tau} f(z - \alpha\tau') g(\tau') d\tau' + f(z - \alpha\tau) \int_{\tau}^{\infty} g(\tau') d\tau'$$

В результате получено выражение для распределения клеток по количеству люциферазы для узкого возрастного интервала возраста τ . Для того, чтобы получить уравнения для функции распределения $f(x)$ и выражение для $\Phi(z)$ – функции распределения популяции клеток по количеству люциферазы нужно знать возрастную структуру популяции.

Вид распределения клеток в популяции по возрастам $\Psi(\tau)$, получим из уравнения, описывающего динамику распределения клеток по возрастам:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n}{\partial \tau} = -\omega(\tau)n$$

где $n(t, \tau)d\tau$ - количество клеток, имеющих в момент t возраст в интервале $[\tau, \tau+d\tau]$; $\omega(\tau)$ – скорость убыли клеток из данного возрастного интервала вследствие деления.

Рассмотрим случай стационарного распределения бактерий по возрастам, т.е. $n(t, \tau)/N(t)$ фиксировано, но общее количество клеток $N(t)$ увеличивается. В случае стационарного распределения удельная скорость роста количества клеток данного возрастного интервала равна удельной скорости роста популяции:

$$\frac{\partial n(t, \tau)}{\partial t} = \mu n(t, \tau) \quad \text{и тогда} \quad \frac{\partial n}{\partial \tau} = -[\omega(\tau) + \mu]n$$

Поделив это уравнение на $N(t)$ получим уравнение для частот:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = -[\omega(\tau) + \mu]\Psi \quad \text{где} \quad \Psi(\tau) = \frac{n(t, \tau)}{N(t)}$$

Скорость деления для простоты зададим ступенчатой функцией [11,

стр.88]:

$$\omega(\tau) = C \Theta(\tau - \tau_1) = \begin{cases} 0, & \tau < \tau_1 \\ C, & \tau \geq \tau_1 \end{cases}$$

тогда плотность распределения делящихся клеток будет иметь вид:

$$\Omega(\tau) = \begin{cases} 0, & \tau < \tau_1 \\ C e^{-C(\tau - \tau_1)}, & \tau \geq \tau_1 \end{cases}$$

где C – интенсивность событий деления клеток. И в результате:

$$\Psi(\tau) = \begin{cases} \Psi_0 e^{-\mu\tau}, & \tau < \tau_1 \\ \Psi_0 e^{-\mu\tau} e^{-C(\tau - \tau_1)}, & \tau \geq \tau_1 \end{cases}$$

Осталось определиться с видом функции $g(\tau)$. Предположения о постоянном количестве репрессора в клетке и о необратимости его связывания с оператором позволяют представить распределение клеток по времени, прошедшем от репликации (деления) до момента связывания репрессора с оператором в виде экспоненциального распределения:

$$g(\tau) = A e^{-A\tau}$$

где A – интенсивность событий.

В результате всех подстановок получаем модель распределения люциферазы по клеткам бактериальной культуры:

$$f\left(\frac{z}{2}\right) = 2 \int_0^{\infty} \Omega(\tau) d\tau \left[\int_0^{\tau} f(z - \alpha\tau') A e^{-A\tau'} d\tau' + 2 f(z - \alpha\tau) e^{-A\tau} \right]$$

$$\Phi(z) = \int_0^{\infty} \Psi(\tau) d\tau \left[\int_0^{\tau} f(z - \alpha\tau') A e^{-A\tau'} d\tau' + f(z - \alpha\tau) e^{-A\tau} \right]$$

где

$$\Omega(\tau) = \begin{cases} 0, & \tau < \tau_1 \\ C e^{-C(\tau - \tau_1)}, & \tau \geq \tau_1 \end{cases} \quad \Psi(\tau) = \begin{cases} \Psi_0 e^{-\mu\tau}, & \tau < \tau_1 \\ \Psi_0 e^{-\mu\tau} e^{-C(\tau - \tau_1)}, & \tau \geq \tau_1 \end{cases}$$

и где $f(z)$ – плотность распределения клеток узкого возрастного интервала по количеству полученной при делении люциферазы; $\Phi(z)$ – плотность распределения клеток по внутриклеточному количеству люциферазы; $\Psi(\tau)$ – плотность распределения клеток культуры по возрастам; $\Omega(\tau)$ – плотность распределения делящихся клеток; A – интенсивность связывания репрессора с оператором; α – скорость синтеза люциферазы, C – интенсивность событий деления клеток; τ_1 – минимальный возраст начала деления клеток.

Полученные уравнения не решаются аналитически, поэтому будем решать их путем последовательных приближений. Но сначала нужно выбрать значения параметров модели. Отметим, что если интенсивность связывания репрессора с активатором – параметр A , приравнять нулю, то мы получим конститутивный синтез белка на протяжении всего клеточного цикла. Естественно сопоставить этот синтез с ростом объема клетки. То есть параметры C и τ_1 можно определить из других независимых распределений, предполагая, что коэффициенты вариации распределений по объему у люминесцентных бактерий и, других грамотрицательных бактерий близки. Соответствие коэффициентов вариации модельного распределения близки значению 24% при $C=4$ и $\tau_1 = 3/4\tau_0$, где τ_0 – среднее время генерации в популяции. При моделировании динамики распределений интенсивности свечения в ходе роста популяции, на очередном шаге итерации подставлялось значение удельной скорости роста μ из результатов моделирования роста популяции, описывающих рост реальной культуры.

Тем самым, результате у нас осталось два подгоночных параметра, вернее полтора – параметр α (скорость синтеза люциферазы) представляет собой, по сути, масштабный множитель, показывающий относительную величину интенсивности свечения, опосредованную в эксперименте квантовой эффективностью самой люциферазы, геометрией регистрирующей системы, определяющей количество света от бактерии попадающее на фотокатод фотоэлектронного умножителя, квантового выхода фотокатода, и отсекаемой дискриминатором доли одноэлектронных импульсов на выходе ФЭУ.

Для описания, полученной в эксперименте динамики распределений, в модели имеется один подгоночный параметр – A – интенсивность событий связывания репрессора с оператором. Результаты вычислений при наиболее подходящем для описания реальных распределений значении $A=2$ показаны на Рис.2.

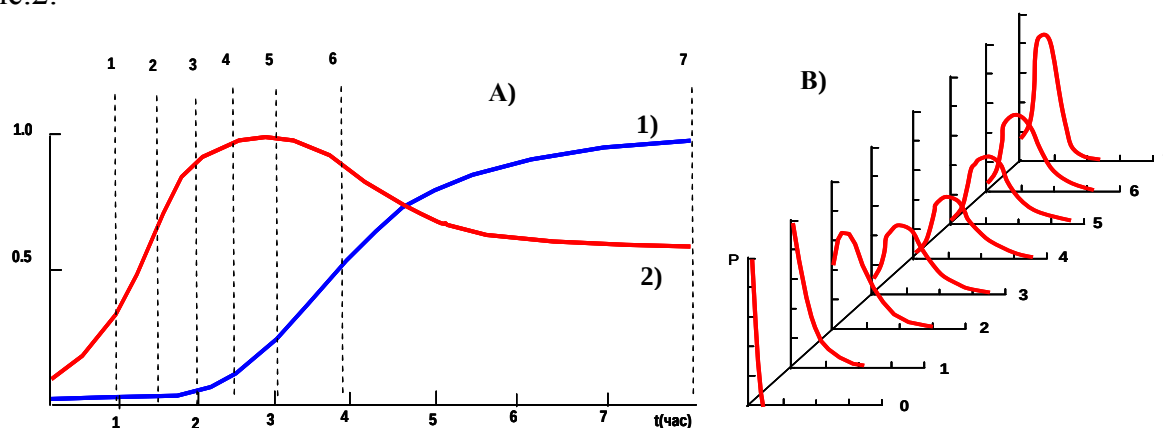


Рис.2. Модельная динамика параметров культуры люминесцентных бактерий (А) и распределений клеток по интенсивности свечения (В). Кривые параметров культуры приведены в относительных единицах: 1 – биомасса; 2 – средняя интенсивность свечения отдельной клетки. Пунктирные линии указывают моменты «взятия проб», а номера соответствуют номерам соответствующих распределений.

При сравнении рисунков 2 и 1 можно видеть вполне удовлетворительное соответствие между ними. Стоит отметить, что это соответствие получено при одном подгоночном параметре, что, по-видимому, свидетельствует о том, что предложенная модель описывает что-то существенное в моделируемой реальной системе.

Нужно отметить, что при выводе модели не учитывалась инактивация люциферазы, что было сделано для упрощения модели, что, впрочем, является обычной практикой (Schwabe, Bruggeman, 2014, стр.306). Паллиативно инактивацию люциферазы можно внести внешним способом – просто смещать точки распределения к 0 в пропорции с их удаленностью от начала координат. В этом случае визуальное представление модели еще больше приблизится к экспериментальным данным.

Однако интересным представляется одно свойство модели, проявившееся в смещении распределений к 0 на последних стадиях развития популяции. К распределению №4 модель практически достигла стационарного состояния и должна была бы в нем остаться. Но поскольку в модели учитывается увеличение длительности времени генерации, вследствие замедления роста культуры, то нарушается установившийся баланс между скоростью синтеза люциферазы и ее распределением между двумя клетками.

Поскольку скорость синтеза конкретного белка связана с состоянием базового метаболизма, то замедление скорости роста клетки и, соответственно, увеличение времени генерации приводит к уменьшению скорости синтеза люциферазы (уменьшению коэффициента α по модели). Но интенсивность событий связывания репрессора с оператором (физический, энергонезависимый процесс) остается прежней. Однако во временных масштабах самой клетки (единица измерения – время генерации) скорость синтеза люциферазы осталась прежней, а интенсивность событий переключения люциферазного оперона увеличилась. Следовательно, согласно модели, существует тесная связь между скоростью роста клетки и содержанием в ней люциферазы, причем, чем выше скорость, тем больше люциферазы синтезируется за клеточный цикл и наоборот.

В заключение можно отметить, что предложенная феноменологическая модель при минимальном числе подгоночных параметров (1.5) удовлетворительно описывает достаточно сложный процесс, имеющий место на протяжении роста бактериальной культуры. Это может быть указанием на то, что структура модели описывает существенные процессы реальной системы. Поскольку в процессе деления все клетки проходят этап освобождения всех регуляторных молекул с молекулы ДНК, то полученные распределения могут реализовываться не только по отношению к люциферазе, но и к другим белкам конститутивного синтеза.

Список литературы

1. Андрюков Б.Г. Гетерогенность в изогенных популяциях бактерий и современные технологии клеточного фенотипирования / Б.Г.Андрюков,

- Н.Ф.Тимченко, И.Н.Ляпун, М.П.Бынина, Е.В.Матосова // Журнал микробиологии, эпидемиологии и иммунобиологии. — 2021. — Т.98. — № 1. С.73 – 83.
2. Taheri-Araghi S. Single-cell physiology / S.Taheri -Araghi, S.D.Brown, J.T.Sauls, D.B.McIntosh, S.Jun // Biophysics. — 2015. — V.44. P.123-142.
 3. Дерябин Д.Г. Бактериальная биолюминесценция: фундаментальные и прикладные аспекты / Д.Г.Дерябин. — М.: Наука, 2009. — 346 с.
 4. Барцев С.И. Динамика распределений люминесцентных бактерий по интенсивности свечения в периодической культуре / С.И.Барцев, А.Н.Шендеров . — Красноярск: Препринт Институт физики СО АН СССР, 1985. — 43 с.
 5. van Heerden J.H. Statistics and simulation of growth of single bacterial cells: illustrations with *B. subtilis* and *E. coli* / J.H. van Heerden, H.Kempe, A.Doerr et al. // Sci Rep. — 2017. — V.7. — 11 p.
 6. Dessalles R. Models of protein production along the cell cycle: An investigation of possible sources of noise / R.Dessalles, V.Fromion, P.Robert // PLoS ONE. — 2020. — V.15. — № 1. — 25 p.
 7. Paulsson J. Summing up the noise in gene networks / J.Paulsson // Nature. — 2004. — V.427. P.415–418.
 8. Schwabe A. Contributions of cell growth and biochemical reactions to nongenetic variability of cells / A.Schwabe, F.J.Bruggeman // Biophys. J. — 2014. — V.107. P.301–313.
 9. Kuwahara H. Beyond initiation-limited translational bursting: the effects of burst size distributions on the stability of gene expression / H.Kuwahara, S.T. Arold, X.Gao // Integrative Biology. — 2015. — V.7. P.1622-1632.
 10. Taniguchi Y. Quantifying *E. coli* proteome and transcriptome with singlemolecule sensitivity in single cells / Y. Taniguchi, P.J. Choi, G.-W. Li, H. Chen, M. Babu, J. Hearn, A. Emili, X.S. Xie // Science. — 2010. — V.329. — № 5991. P.533–538.
 11. Романовский Ю.М. Математическая биофизика / Ю.М.Романовский, Н.В.Степанова, Д.С.Чернавский. — М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1984. — 304 с.

ЗАВИСИМОСТЬ УСТОЙЧИВОСТИ ЭКОСИСТЕМЫ ОТ СТЕПЕНИ ЕЕ ЗАМКНУТОСТИ¹

С.И.Барцев^{1,2,3}, А.Г.Дегерменджи¹

¹Институт биофизики СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, BartsevSI@ibp.ru

²Сибирский федеральный университет,

³Сибирский госуниверситет им. М.Ф.Решетнева

Замкнутость круговорота веществ является необходимым условием длительного (потенциально, произвольно длительного) существования биосферы. Однако, высокий уровень замкнутости потоков веществ по лимитирующему химическому элементу (как правило, по азоту или фосфору) характерен и для большинства экологических систем. Поэтому влияние замкнутости трофических цепей на свойства экосистемы представляет определенный интерес. Одним из важнейших свойств экосистем является их устойчивость.

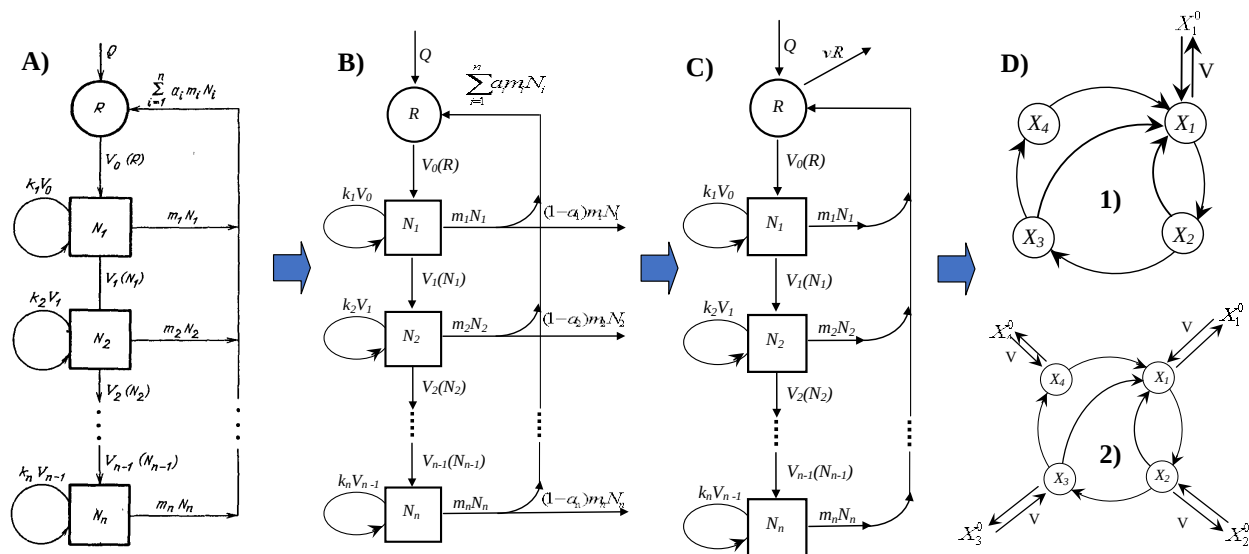


Рис.1. Эквивалентные преобразования схемы замкнутой экологической системы. Этапы преобразования: А – исходная схема; В – явное представление исходящих потоков веществ; С – естественное слияние потоков минеральных соединений; D – обобщенное представление неполнозамкнутой экологической системы.

¹ Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 0287-2021-0019).

То, что замкнутость сама по себе не определяет устойчивость экосистемы показано в классической работе Ю.М.Свирижева [1]. Он показал, что существование стационарного состояния, осцилляций или хаоса в 100% замкнутой системе определяется общим количеством биогена в системе. Однако вопрос об изменении свойств экосистемы при изменении степени ее замкнутости остается актуальным. Для начала несколько преобразуем схему Свирижева, представляющую экосистему, как цикл лимитирующего элемента, имеющий один канал обмена с внешней средой (Рис.1).

Суть изменений схемы заключается в следующем. В исходной схеме, при рассмотрении случая неполнозамкнутой системы сделано предположение, что только часть образовавшегося минерального соединения (доля задается коэффициентами a_i) возвращается в начало цикла. Мы просто явно показываем поток веществ, покидающих систему, но поскольку это есть одно и то же химическое соединение, как следуют из исходной схемы, то естественно все стрелки замкнуть на пул R , а долю приходящего и уходящего вещества сделать зависимой от разности концентраций в системе и вне ее. При этом возможны разные варианты обмена с внешней средой – по одному компоненту экосистемы, например, по биогену, или по нескольким, включая миграцию организмов, или, что наименее вероятно, по всем компонентам (Рис.1D2).

На фоне большого разнообразия возможных видов трофических функций [2] возникает вопрос: можно ли что-то сказать об изменении стабильности трофической цепи при изменении степени замкнутости без указания типа трофических функций. Представляется интересным оценить, как конфигурация обмена биогенами и организмами с внешней средой влияет на стабильность экосистемы.

Начнем с самого простого варианта. В общем случае схема на Рис.1D1 может быть описан следующей системой уравнений:

$$\begin{cases} \dot{X}_1 = F_1(\vec{X}) + V(X_1^0 - X_1) \\ \dot{X}_i = F_i(\vec{X}) \end{cases}, \quad (1)$$

где V – константа скорости обмена с внешней средой; $\vec{X}$ - вектор концентраций

веществ или биомассы организмов, составляющих экосистему; X_1^0 - концентрация веществ или биомассы организмов во внешней среде.

Стационарное состояние, если оно достигается системой, существует при $X_1^* = X_1^0$. Отметим, что для системы (1) стационарное состояние одно и то же для любых ненулевых значений V . Устойчивость по Ляпунову определяется видом и знаками действительных частей собственных значений соответствующей линеаризованной системой. Собственные значения системы (1) можно найти, решая следующее уравнение при стационарных значениях биомасс и концентраций веществ:

$$\Delta''_{NC} \equiv \begin{vmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial X_1} - V - \lambda & \frac{\partial F_1}{\partial X_2} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial X_N} \\ \frac{\partial F_2}{\partial X_1} & \frac{\partial F_2}{\partial X_2} - \lambda & \dots & \frac{\partial F_2}{\partial X_N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial F_N}{\partial X_1} & \frac{\partial F_N}{\partial X_2} & \dots & \frac{\partial F_N}{\partial X_N} - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

Но поскольку мы не знаем конкретный вид правых частей уравнений, то мы не можем явно вычислить собственные значения. Метод кругов Гершгорина [3] позволяет локализовать собственные значения используя элементы якобиана при стационарных значениях переменных. Собственные значения системы локализованы в объединении всех кругов Гершгорина. Действительная часть всех собственных значений отрицательна, если выполняются следующие неравенства:

$$a_{ii} < 0, |a_{ii}| > R_i, \text{ где } R_i = \sum_{j \neq i} |a_{ij}| - \text{радиус } i\text{-го круга Гершгорина,}$$

где a_{ij} – элементы матрицы линейной аппроксимации исследуемой системы.

В нашей системе с увеличением V (уменьшением замкнутости трофической цепи) круг Гершгорина, соответствующий первой переменной, смещается в сторону отрицательных значений (положение центра i -го круга находится в точке a_{ii}). Поскольку собственные значения локализованы в объединении всех кругов Гершгорина и их распределение в этом объединении не известно, то смещение одного из кругов в отрицательную область не гарантирует повышения устойчивости всей системы. Мы можем быть уверены, что

устойчивость системы точно не ухудшится, и есть ненулевая вероятность, что устойчивость системы возрастет.

Все вышесказанное было бы справедливо, если бы стационарные состояния в процессе изменения замкнутости не менялись, что невозможно гарантировать. Тем самым нужно признать, что доля неопределенности прогноза отклика экосистемы на изменение уровня замкнутости возрастает.

Однако можно предположить, что чем больше каналов обмена с внешней средой, с тем большей вероятностью возрастает устойчивость системы, просто вследствие того, что большее количество кругов смещается в отрицательную полуплоскость. И предельным вариантом является обмен с внешней средой по всем компонентам. Очевидно, что с ростом константы скорости обмена, значения переменных системы приближаются к внешним значениям, влияние трофических уровней друг на друга становится все менее значимым, и мы приходим, в конечном счете, к фактическому исчезновению экосистемы.

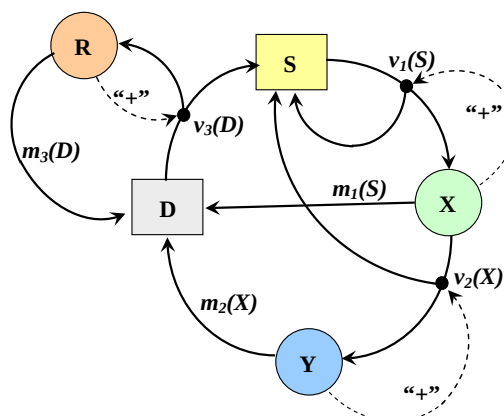


Рис.2. Простейшая модель замкнутой экологической системы, включающая основные трофические уровни. Обозначений переменных: S – минеральный биоген; X – продуцент; Y – консумент; D – детрит; R – редуцент. Штриховые стрелки условно отображают автокаталитическое действие живых организмов.

Для оценки общности предполагаемой тенденции к росту устойчивости системы при уменьшении степени замкнутости требуются массивные вычислительные эксперименты для разных конфигураций экосистем и для разных видов трофических функций. Наш задача гораздо скромнее – проверить,

выполняются ли описанный прогноз хоть в каком-либо количестве случаев и не нейтрализуется ли смещение кругов Гершгорина в отрицательную полуплоскость изменением стационарного состояния системы, вызванным обменом с внешней средой.

Для проверки была выбрана простая модель замкнутой экосистемы, включающая классические трофические уровни – продуцентов, консументов, редуцентов, а также детрит и биоген в минеральной форме (Рис.2). Каналы обмена с внешней средой не показаны, поскольку их конфигурация менялась в ходе вычислительных экспериментов.

Математическая модель системы, представленной на Рис.2 имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \dot{S} = -\gamma_1 v_1(S)X + (1-\gamma_2)v_2(X)Y + (1-\gamma_3)v_3(D)R \\ \dot{X} = \gamma_1 v_1(S)X - v_2(X)Y - m_1(S)X^2 \\ \dot{Y} = \gamma_2 v_2(X)Y - m_2(X)Y^2 \\ \dot{D} = -v_3(D)R + m_1(S)X^2 + m_2(X)Y^2 + m_3(D)R^2 \\ \dot{R} = \gamma_3 v_3(D)R - m_3(D)R^2 \end{cases} \quad (2)$$

где $v_i(X_i) = \frac{V_i X_i}{K_i + X_i}$ $m_i(x_j) = m_i$ - в варианте 1, $m_i(x_j) = \frac{A_i + b_i x}{1 + cx}$ - в варианте 2, и обозначения переменных в модели соответствуют обозначениям на Рис.2. Параметры модели, используемые в вычислительных экспериментах: $S_0, X_0, Y_0, D_0, R_0, A_i, b_i, V_2, V_3, K_3=1; g_i=0.5; m_1, m_3=0.1, m_2=0.3, V_1=2, K_1=0.5, K_2=0.6; c=10$.

Прежде, чем приступить к результатам вычислительных экспериментов необходимо дать несколько комментариев по устройству модели.

Во-первых, в модели (2) не учтен явно закон сохранения по биогену и его формам, поскольку исследоваться будут случаи нарушения замкнутости путем добавления к уравнениям слагаемого, описывающего обмен с внешней средой, как это показано для системы (1).

Во-вторых, выбор квадратичной зависимости отмирания особей, соответствующий уравнению Ферхюльста выбран по причине несовместимости линейной зависимости отмирания с обеспечением стационарного состояния при обмене с внешней средой. Например, если в модели рассматривается случай

обмена особями X с внешней средой, то стационарное состояние системы возможно, когда $\bar{X} = X_0$. Тогда уравнение стационарности для консумента (хищника) в случае линейного отмирания будет иметь вид: $\gamma_2 v_2(X_0)Y - m_2(X_0)Y = 0$ или $\gamma_2 v_2(X_0) - m_2(X_0) = 0$. То есть существование стационарного состояния в данной модели возможно, только если генетически определяемые соотношения параметров жизнедеятельности консумента в точности соответствуют параметру внешней среды, ну, или наоборот, что практически невозможно.

В-третьих, два варианта модели выбраны для того, чтобы оценить влияние фактора голодания на динамику популяций. Дело в том, что использование константы скорости отмирания задает смертность организмов, связанную со старением организмов. Однако в переменных условиях среды, при дефиците питания смертность должна многократно возрастать, что, по-хорошему, должно быть отражено в модели.

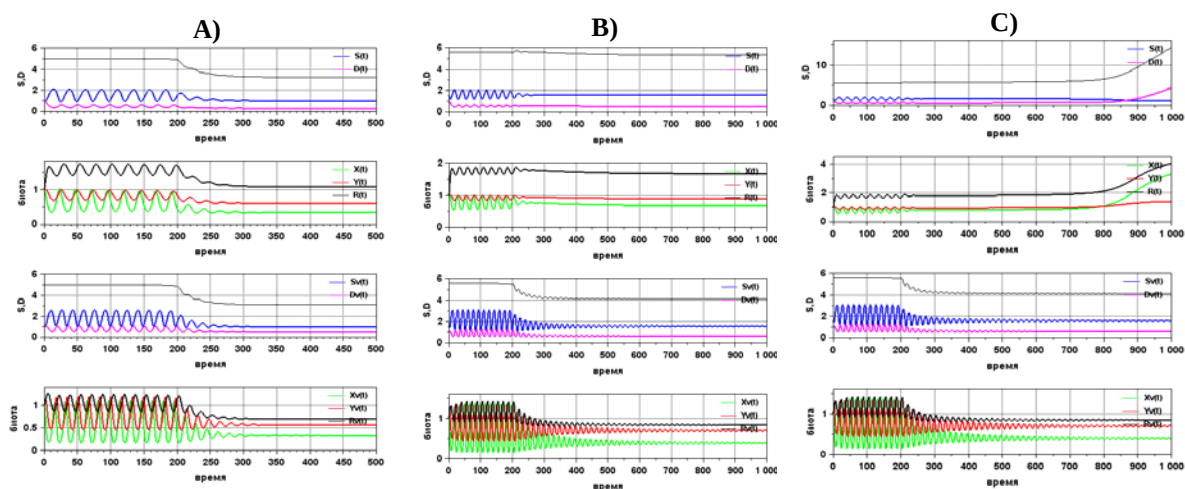


Рис. 3. Изменение стабильности системы при изменении общего количества биогена путем изменения S_0 , при $V=0,1$. Верхняя пара графиков – система с постоянным коэффициентом отмирания, нижняя – зависимым от количества субстрата. На графиках – тонкая черная кривая – общее количество биогена в системе. Возрастание V от 0 до указанного выше значения плавно происходит, начиная с 200-го момента времени. Столбец А – величина $S_0=1$; В – $S_0=1,58$; С – $S_0=1,59$.

В вычислительных экспериментах значения параметров подобраны так,

чтобы модели демонстрировали колебания численности, чтобы было на что действовать. В первую очередь нужно отметить, что реакция моделей на переход от замкнутого состояния к частично замкнутому является разнообразной. Так, например, увеличение V от 0 до 0,1 приводит к ожидаемому гашению осцилляций в обеих моделях (Рис.3А).

В то же время следует отметить, что при открытии канала обмена общее количество биогена в системе заметно уменьшается (тонкая черная кривая верхних подрисунков каждой пары). Это наводит на мысль, что возможно здесь срабатывает закономерность, найденная Свирежевым [1] – чем больше биогена в системе, тем она менее стабильна. Для проверки этого предположения была увеличена концентрация биогена S_0 , таким образом, чтобы суммарное количество биогена при переходе к частичной замкнутости осталось неизменным. В результате, при увеличении S_0 на одну сотую ($S_0=1,58$ до $S_0=1,59$) наблюдается резкий переход первой модели в состояние неограниченного увеличения количества биогена в системе, т.е. потеря этой моделью всякой связи с реальностью. Причины этого интересны, но выходят за рамки данной статьи.

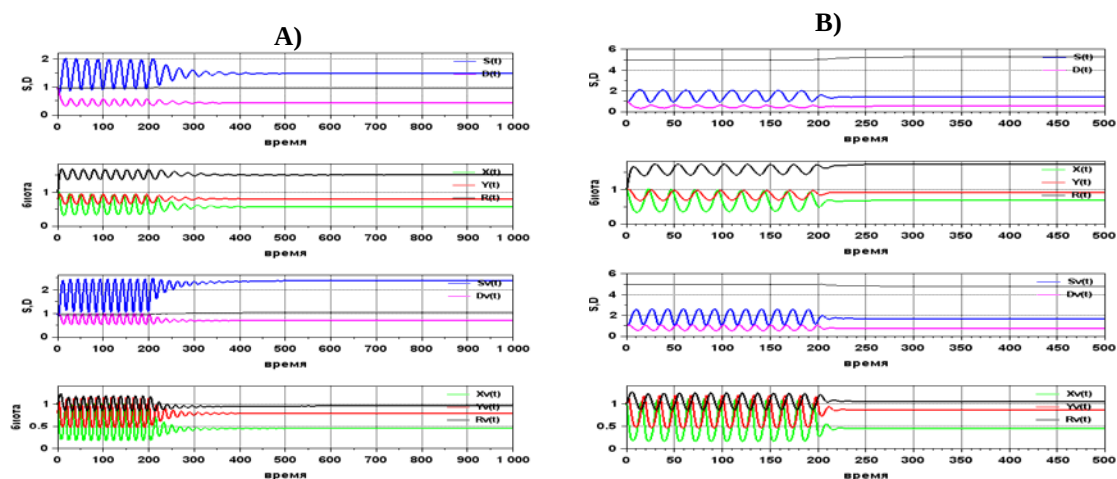


Рис.4. Ожидаемые результаты изменения степени замкнутости. Случай А – повышение устойчивости систем, обменивающихся по Y , при неизменном количестве биогена и слабо изменившихся стационарных состояниях переменных и $V=0.1$. Случай В – возрастание устойчивости систем, обменивающихся по S, X, Y при $V=0.1$. Нужно отметить, что, как и ожидалось, устойчивость сохранялась и при больших значениях V .

В то же время модель демонстрирует и ожидаемое поведение. На Рис.4 показаны примеры соответствия поведения обеих моделей прогнозу, что наблюдалось и при других значениях параметров и конфигураций системы.

Тем не менее наибольший интерес вызывают неожиданные эффекты (Рис.5), природа которых требует более детального анализа устойчивости моделей при установленных параметрах. Необычность первого феномена – падение устойчивости при существенном увеличении константы скорости обмена со средой – V не может быть объяснено изменением стационарного состояния, поскольку оно не зависит от величины этого параметра. Вторым феноменом – отсроченное переключение в новое стационарное состояние достаточно необычен на фоне практически неизменных (при переходе к частичной замкнутости) значениях двух переменных обмена – S и Y .

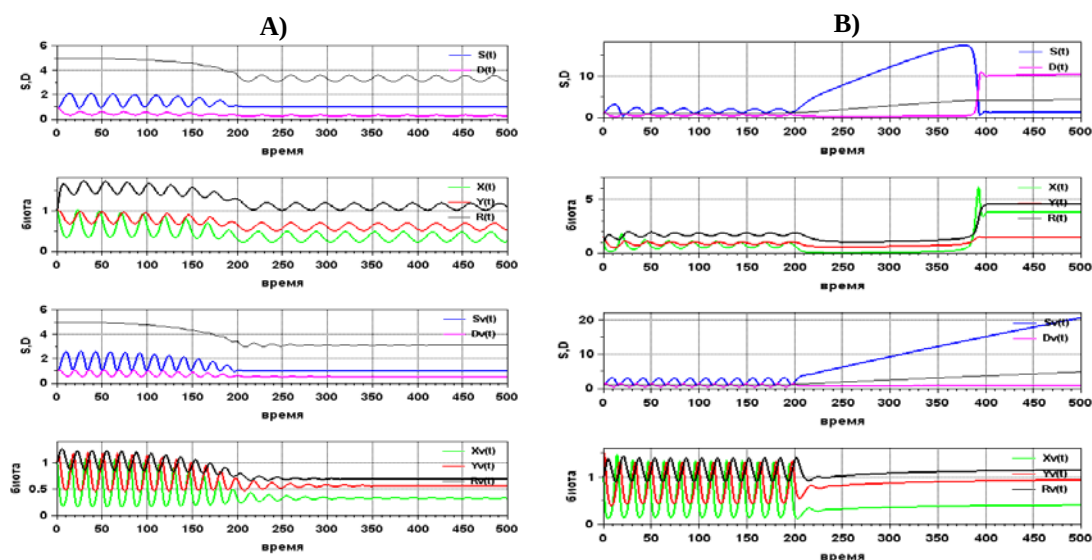


Рис. 5. Неожиданные эффекты, обнаруженные в ходе вычислительных экспериментов. Случай А – возникновение неустойчивости в системе, обменивающейся со средой по S , при увеличении V до 3. Случай В – возникновение в системе отсроченного переключения в новое стационарное состояние (модель 1) системы, обменивающейся со средой по S и Y при небольшом увеличении Y_0 и незначительном превышении общего количества биогена над исходным.

В завершение можно сделать ряд выводов.

Во-первых, вычислительные эксперименты показали, что устойчивость

системы при увеличении V довольно часто возрастает, но в ряде случаев это может быть связано с понижением количества биогена в системе из-за утечки во внешнюю среду.

Во-вторых, большие значения константы скорости обмена с внешней средой – V могут вызывать либо потерю устойчивости особой точки модели, либо привести к неограниченному росту биогена в системе. Это с одной стороны может указывать на несовершенство модели, а с другой может наводить на мысли о возможном сценарии развития экологической катастрофы.

В-третьих, учет фактора голодания при описании скорости отмирания организмов не повлиял заметно на устойчивость исследованной модели экосистемы, что, в принципе, противоречит ожиданиям.

В-четвертых, в случае, когда экосистема обменивается с внешней средой по S , X , Y компонентам увеличение V приводит к возрастанию устойчивости, которая не нарушается и при больших значениях V , что, в принципе, ожидаемо – интенсификация обмена с внешней средой по большинству компонентов соответствует фактическому исчезновению экосистемы.

Список литературы

1. Свирежев Ю.М. Нелинейные волны, диссипативные структуры и катастрофы в экологии / Ю.М.Свирежев . – М.: Наука. 1987. – 368 р.
2. Тютюнов Ю.В. От Лотки-Вольтерра к Ардити-Гинзбургу: 60 лет эволюции трофических функций / Ю.В.Тютюнов, Л.И.Титова // Журнал общей биологии. – 2018. – Т. 79. – №6. С.428-448.
3. Хорн Р. Матричный анализ / Р. Хорн, Ч. Джонсон. – М.: Мир, 1989. – 655 с.

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
ЗАПУСКА БИОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В НАКОПИТЕЛЬНОЙ КУЛЬТУРЕ
Photobacterium phosphoreum 1889**

С.И.Барцев^{1,2}, А.Б.Сарангова²

¹ Институт биофизики СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, BartsevSI@ibp.ru

² Сибирский федеральный университет, sarangova.antonina@yandex.ru,

Одна из задач современной микробиологии состоит в изучении механизмов запуска кворум-эффекта, который был обнаружен при изучении биолюминесценции [1] в бактериальных популяциях, но наибольшее развитие его изучение получило в области медицинской микробиологии. Внимание к данному эффекту объясняется тем, что обнаруженный кворум-эффект регулирует физиологическую активность микробов, а именно влияет на симбиоз, вирулентность, конъюгацию, синтез антибиотиков, подвижность, образование спор, формирование биопленки [2] и биолюминесценцию. Предложено большое количество моделей различной математической природы, описывающих детали межмолекулярных внутриклеточных и межклеточных взаимодействий [3-5]. Однако представляет интерес построение минимальной по сложности модели, описывающей ключевые закономерности развития кворум эффекта, и позволяющей ставить простые вопросы в отношении его базового механизма.

Согласно современным представлениям аутоиндуктор синтезируется клеткой на некотором постоянном базовом уровне и по мере роста численности бактерий в популяции его концентрация нарастает [1, 2]. По достижению некоторого порогового уровня запускаются процессы, контролируемые кворум-эффектом, в нашем случае это синтез люциферазы. В большинстве моделей рост бактериальной культуры рассматривается как независимый от кворум-эффекта процесс, и, для простоты, мы тоже примем это предположение при построении модели.

Рассмотрим простую феноменологическую (то есть без расписывания межмолекулярных взаимодействий) модель описывающую динамику роста и

свечения бактериальной культуры. Предварительный анализ динамики роста используемой в эксперименте культуры *Ph.phosphoreum* 1889 показал, что широко используемая логистическая функция и функция Гомперца (Gompertz function) [5] недостаточно хорошо описывают экспериментальные кривые и поэтому в модели использована модель ограничения роста культуры вследствие истощения субстрата с учетом возможного субстратного ингибирования на начальных стадиях роста (1). В модели учтен закон сохранения по общему количеству субстрата и его превращенных форм. Исходный вариант модели имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dN}{dt} = v(N) \\ \frac{dA}{dt} = Gv(N) - mA \\ \frac{dL}{dt} = \Theta(A - A_0)v(N) - k_d L \end{cases}, \quad (1)$$

$$v(N) = \frac{\mu_0 N (S_0 - \alpha N)}{K_s + (S_0 - \alpha N) + K_i (S_0 - \alpha N)^2}$$

где N – биомасса бактерий; A – концентрация аутоиндуктора в среде; L – концентрация люциферазы; G – коэффициент, характеризующий скорость синтеза аутоиндуктора; S_0 – начальная концентрация субстрата; K_s – константа Моно; K_i – обратная константа ингибирования избытком субстрата; α – экономический коэффициент; m – константа скорости инактивации аутоиндуктора в культуральной среде; k_d – константа скорости инактивации люциферазы; Θ – ступенчатая функция Хевисайда.

Аппроксимация параметров модели осуществляли в соответствии с критерием минимума среднеквадратичного отклонения. Результаты вычислительного моделирования и сопоставления с экспериментальными данными приведены на Рис.1.

Из рисунка можно видеть, динамика биомассы описана вполне адекватно, в то время как реальная динамика биолюминесценции существенно отличается от модельной. Бросается в глаза резкое включение синтеза люциферазы, демонстрируемое моделью. Интересно, что полученная динамика

свечения почти идеально подходит к описанию совместной динамики биомассы и люминесценции, наблюдаемой для другого вида бактерий – *V.fischeri* [6]. Это расхождение наводит на мысль, что механизмы регуляции синтеза люцифразы могут быть существенно видоспецифичными.

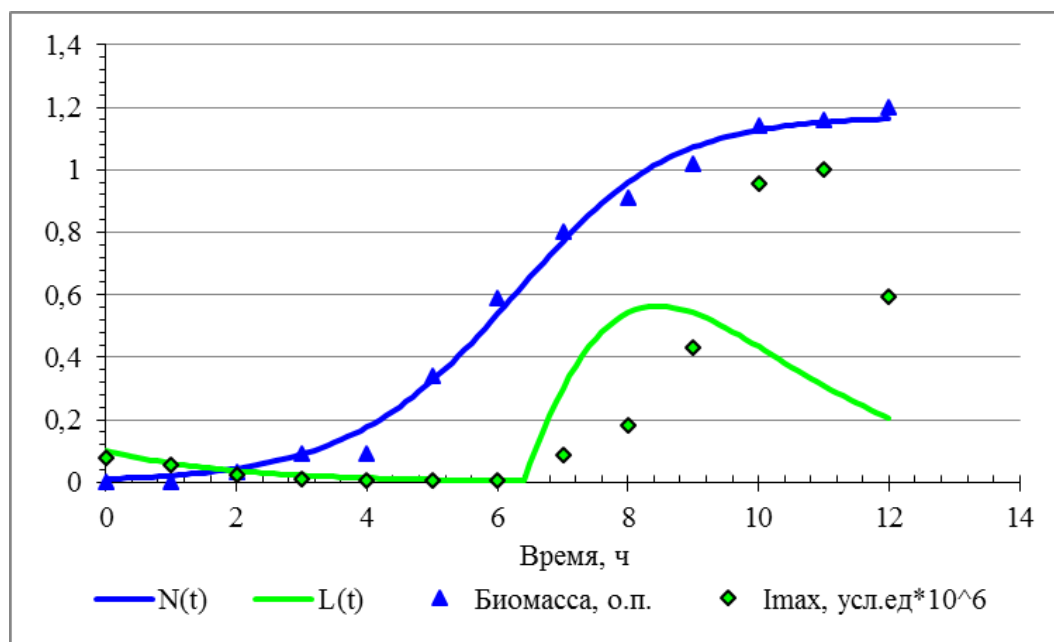


Рис. 1. Экспериментальные данные роста накопительной культуры *Rh. phosphoreum* 1889 и их модельное описание.

Для объяснения наблюдаемого постепенного нарастания интенсивности люминесценции культуры было сделано предположение, что это вызвано возрастной гетерогенностью бактериальной популяции [7]. В соответствии с предположением чувствительность бактериальной клетки к концентрации аутоиндуктора, а значит, возможность включения люциферазного оперона возможна только в определенную стадию клеточного цикла. В этом случае, промежуток времени, в течение которого все клетки популяции включают люциферазный оперон, равен времени генерации клеток при даны условиях культуры. В модели распределение клеток по возрастам для простоты предполагалось равномерным, что позволило описать темпы включения клеток простой зависимостью (Рис.2), где протяженность наклонного участка равна средней длительности клеточного цикла.

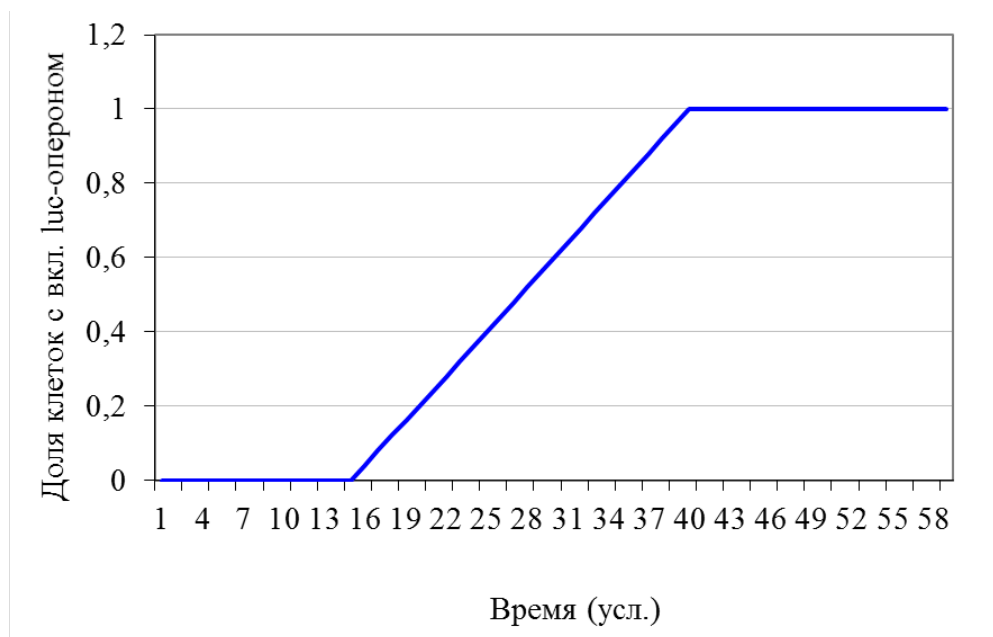


Рис.2. Феноменологическая зависимость доли клеток с включенным люциферазным опероном – функция $I(t)$.

В результате исходная модель претерпела минимальные изменения – был добавлен зависимый от времени множитель в уравнение, описывающее синтез люциферазы (2).

$$\begin{cases} \frac{dN}{dt} = v(N) \\ \frac{dA}{dt} = \alpha G v(N) - mA \\ \frac{dL}{dt} = I(t) \alpha v(N) - k_d L \end{cases} \quad (2)$$

$$v(N) = \frac{\mu_0 N (S_0 - \alpha N)}{K_s + (S_0 - \alpha N) + K_i (S_0 - \alpha N)^2}$$

Вычислительные эксперименты с модифицированной модель показали существенное улучшение качества описания экспериментальных кривых (Рис.3-4). Однако нужно отметить, что наблюдаемая пологость кривой роста свечения все же не была достигнута. Вероятнее всего это связано с изогенной (фенотипической) вариативностью клеток [8] и модель нуждается в дальнейшей модификации.

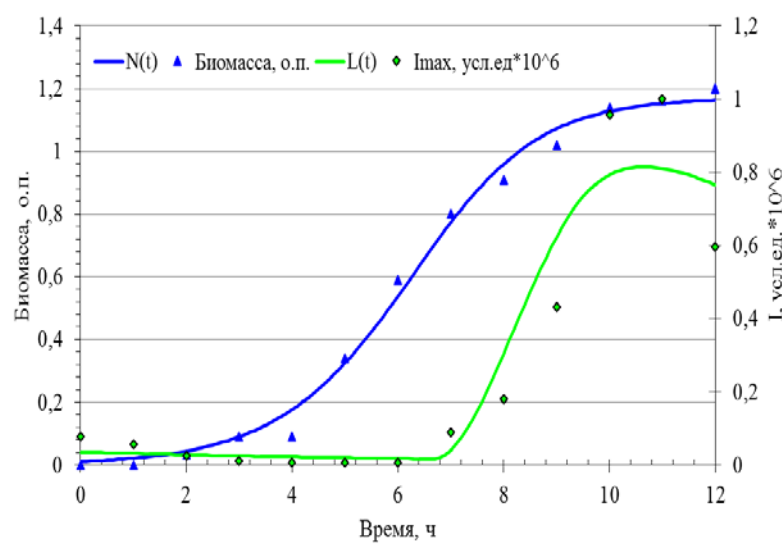


Рис. 3. Экспериментальные данные роста накопительной культуры Rh. phosphoreum 1889 и их описание с помощью модифицированной модели.

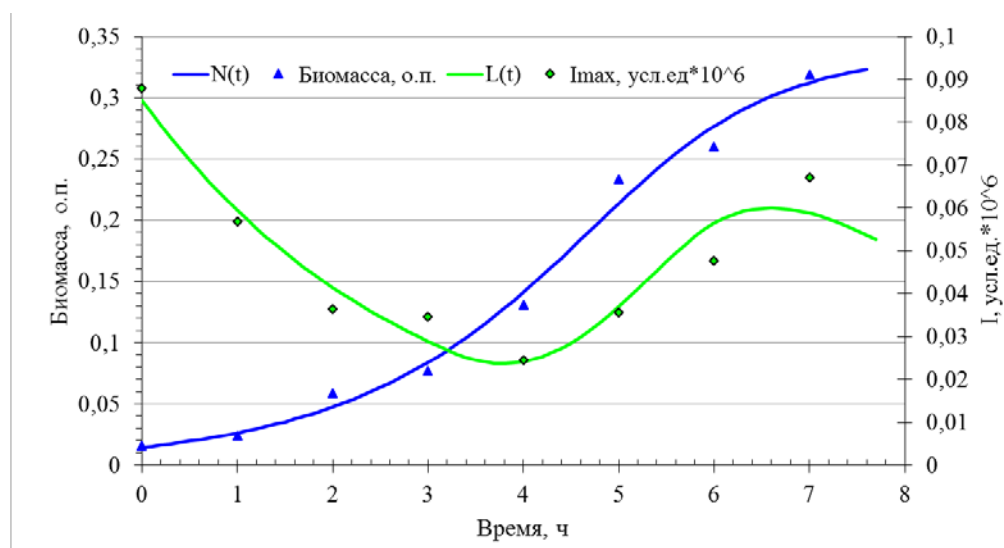


Рис. 4. Экспериментальные данные роста накопительной культуры Rh. phosphoreum 1889 и их описание с помощью модифицированной модели для бедной среды (0,1 г/л пептона).

Наблюдаемое на Рис.4 четырех кратное уменьшение плотности биомассы при падении интенсивности свечения более чем на порядок может

означать, в данных условиях интенсивность свечения зависит не только от концентрации люциферазы в клетках, как это неявно предполагалось в рассматриваемой модели, но и от концентрации или доступности субстрата люминесцентной реакции, конкурирующей в клетке с цепью окислительного фосфорилирования.

В результате можно подвести итоги использования предельно простой модели для описания достаточно сложно биологического процесса.

Во-первых, сравнение модельной динамики с полученными и опубликованными данными о динамике люминесценции другого вида бактерий, указывает на возможность видоспецифических механизмов регуляции кворум-эффекта.

Во-вторых, на основе анализа модели можно предположить, что внутриклеточные события взаимодействия некоторых факторов транскрипции с ДНК возможны не на любой стадии клеточного цикла. По крайней мере, это может наблюдаться для некоторых видов. Кроме того, сопоставление экспериментальных данных и модели позволяет предположить, что реакция клетки на аутоиндуктор модулируется фенотипической изменчивостью.

В-третьих, несогласованное изменение плотности биомассы, характеризующей базовый синтез белков, и интенсивности свечения клеток может свидетельствовать и служить индикатором перехода бактерий на «голодный режим», что может быть полезным при культивировании люминесцентных бактерий.

Список литературы

1. Kempner E. S. Aspects of Light Production by *Photobacterium fischeri* / E.S.Kempner, F.E.Hanson // Journal of Bacteriology – 1968. – Vol. 95 – №3 – P. 975–979.
2. Степанова Т.Ю. Микробиология ротовой полости./ Т.Ю.Степанова, А.Б. Тимофеева Современные проблемы науки и образования // 2016. -. №5. - URL: <https://science-education.ru/ru/article/view?id=25212> (дата обращения: 27.09.2022).

3. Chopp D.L. A mathematical model of quorum sensing in a growing bacterial biofilm / D.L.Chopp, M.J.Kirisits, B.Moran, M.R.Parsek // Journal of Industrial Microbiology & Biotechnology. – 2002. – 29. – 339 – 346.
4. Pérez-Velázquez J. Mathematical Modelling of Bacterial Quorum Sensing: A Review Bull Math Biol // J.Pérez-Velázquez, M.Gölgeli, R.García-Contreras - 2016. - .56p.
5. C.E.Torres-Cerna Mathematical Modelling of the Quorum Sensing in *Vibrio harveyi* / C.E.Torres-Cerna, E.A. Hernandez-Vergas Revista // Mexicana de ingenieria biomedica – 2019.- Vol.40. - №1. – P. 1-10
6. Kenneth H. Cellular Control of the Synthesis and Activity of the Bacterial Luminescent System / H.Kenneth Nelson, J. Terry, W. Hastings // Journal of bacteriology, October 1970. - Vol.104. - №1.- P.313-322.
7. van Heerden J.H. Statistics and simulation of growth of single bacterial cells: illustrations with *B. subtilis* and *E. coli* / J.H. van Heerden, H.Kempe, A.Doerr et al. // Sci Rep. — 2017. — V.7. — 11 p.
8. Schwabe A. Contributions of cell growth and biochemical reactions to nongenetic variability of cells / A.Schwabe, F.J.Bruggeman // Biophys. J. — 2014. — V.107. P.301–313.

ANTHROPOMETRIC DIFFERENCES BETWEEN SIBERIAN INDIVIDUALS USING STATISTICS

C.Botella¹, N.P.Kuzenkov¹

¹Siberian Federal University,

School of Space and Information Technology, *knnp@vivaldi.net*

Anthropometry can be defined as the physical and biological human measurement for scientific application. Usually, this type of study can be very useful for enhancing safety and comfort related to the design of equipment and facilities. Moreover, if such differences exist, they can be considered in medicine and drug prescription for instance. In the empirical literature, one can find some articles treating about anthropometric heterogeneity among human groups (Widyanti et al. 2015 [1], Yap and al. 2001 [2] and Kagawa et al. 2007 [3]) since this type of topic draws some curiosities and can be used for different purposes (medical, comfort). In this paper, we study a data set containing anthropometric data for Russian, Khakas and Tuvan males and females measured by Federal Research Center «Krasnoyarsk Science Center» of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences in order to establish the difference between the measured anthropometric parameters and the dependences of anthropometric parameters in this groups.

Our sample includes the following elements: body length, mass, shoulder width, pelvis width, heart rate (heartbeat by minute), breath rate (by minute), the systolic blood pressure when the blood is ejected in arteries and diastolic blood pressure when heart is relaxed. These elements are divided between four groups: Russian men (174 observations), Russian women (355 observations), Khakas men (237 observations), Khakas women (347 observations), Tuvan men (13 observations) and Tuvan women (43 observations). It is important to note that the number of observations for Tuvan individuals is not large enough to support statistical hypothesis, particularly for men.

Since our variable of interest is the ethnicity, comparison is performed between pairs of ethnicities among respective males on the one hand and among female on the other hand. On the first step, we researched if distributions of

anthropometric variables follow a Gaussian Law (very common in nature) using the Jarque-Bera test. This test aims to estimate if the addressed distribution is likely to follow a Gaussian Law or not. After performing this test, we observed that, for all groups, most of characteristics don't follow a Gaussian Law. However, there is some exceptions as the heart rate and the blood pressure for both Russian men and women. Regarding Tuvan individuals, some of measurement present normality regarding the test but this last cannot be supported theoretically because of the lack of observation for this ethnicity. On the second step, we computed the mean of anthropometric elements in each group and its confidence intervals at 95% using Box-Cox transformation in cases of absence normal distribution.

As we can observe in the table 1, body length, mass and shoulder width seem to be very different between each pair of ethnical groups (Russian/Khakass, Russian/Tuvan and Khakass/Tuvan) for both males and females.

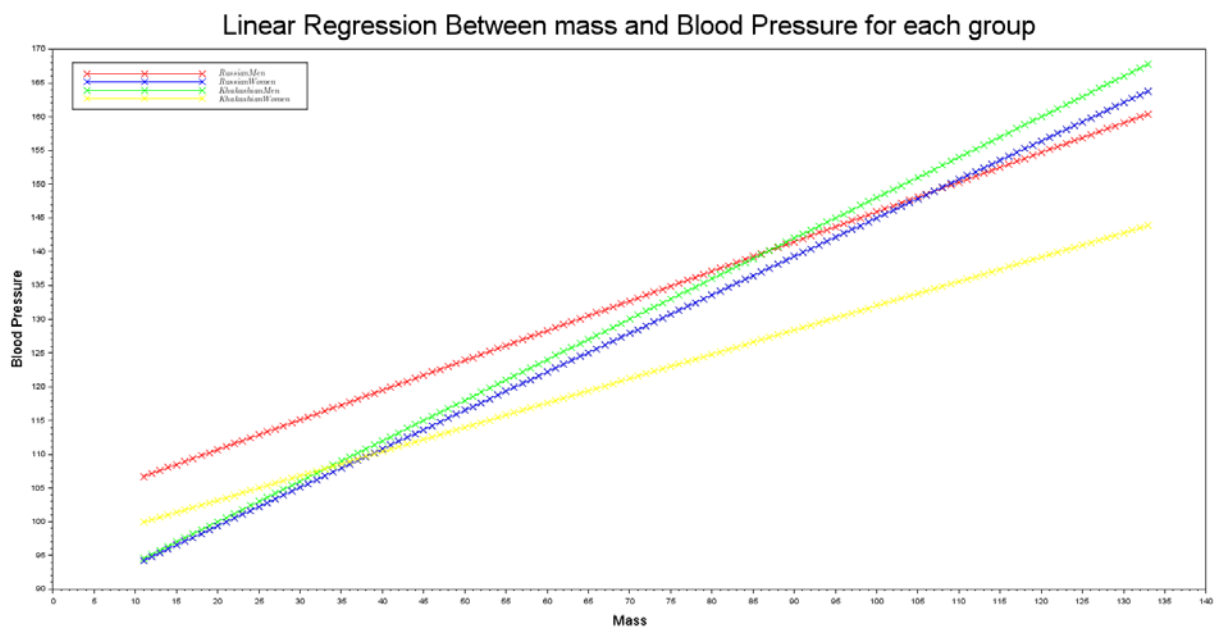
Nonetheless, this trend is not so apparent for other elements. Means indicate the same conclusions. Although it seems evident that body length and mass are positively correlated, the theoretical link between blood pressure and body size for example is not so obvious. That is why we performed some regressions between measurements. Due to the lack of observations for Tuvan individuals, we realized the following steps only for Russian and Khakass groups. Regarding the results of measurement regressions, we found only significant positive coefficients as for example concerning blood pressure and mass between Khakass and Russian groups on the graph1.

Table 1: confidence interval for measurements in each group

Confidence Interval (95%)	Russian		Khakashian		Tuvan	
	Men	Women	Men	Women	Men	Women
Body Length	[177; 179]	[163; 165]	[165; 168]	[156; 158]	[169; 172]	[156; 160]
Mass	[67.9; 73.0]	[56.3; 58.6]	[36.4; 37.2]	[49.3; 51.3]	[37.5; 41.1]	[49.8; 55.0]

Shoulder	[39.6; 40.6]	[34.9; 35.4]	[36.41; 37.2]	[33.3; 33.9]	[37.5; 41.1]	[34.4; 35.6]
Pelvis	[27.3; 28.3]	[26.9; 27.5]	[26.1; 26.7]	[25.8; 26.3]	[26.8; 29.8]	[26.6; 27.9]
Heart Rate	[77.0; 83.0]	[81.4; 85.4]	[76.2; 80.2]	[80.1; 82.7]	[62.6; 80.1]	[69.3; 75.4]
Breath Rate	[19.0; 20.7]	[19.1; 20.5]	[19.0; 20.1]	[18.4; 19.6]	[20.1; 24.7]	[17.4; 19.9]
Systolic Blood Pressure	[129; 135]	[122; 126]	[119; 123]	[114; 117]	[127; 143]	[112; 119]
Diastolic Blood Pressure	[72.0; 77.3]	[75.5; 79.0]	[67.3; 70.1]	[68.7; 71.2]	[70.3; 79.3]	[70.4; 75.7]

On the graph 1, the red line represents the correlation between mass and blood pressure for Russian men, the blue one is for Russian women, the green one is for Khakass men and the yellow one is for the Khakass women.



Pic. 1. Regression between Mass and Blood Pressure for Khakass and Russian individuals.

This graph allows us to see an example of positive correlation between measurements. However, it also appears that this positive relation is not the same for other groups, as can be seen for all regressions performed. Accordingly, we must determine the significance of differences between these trends.

In order to do so, after having differentiated coefficients of regression obtained for all pairs of measurements such as:

$$Coeff_{Russian} - Coeff_{Khakas}$$

we performed a bootstrap method for statistical inference. So, the method consists of randomly reorganizing groups of the same sex, performing regression by group to differentiate their coefficients and repeating this step 10000 times to obtain a distribution of differences. Finally, we could compare deviation obtained from the initial dataset to the distribution. Regarding the proportion of data below the initial difference, we could determine if this last is significantly above zero or not, knowing that the distribution was obtained from a random process. In our case, we chose a threshold of 5%, meaning that if the proportion of differences from the distribution below the initial one was higher than 95%, then we considered the coefficient of the regression from one group was significantly higher than the one from another group.

We performed this algorithm for all pairs of measurement respectively for men and women and we obtained the tables 2 and 3.

Table 2. likelihood of H0 (the Russian coefficient higher than Khakas one)

Women (blue) / Men (red)	Body length	Mass	Shoulder width	Pelvis width	Blood Pressure Systolic
Body length		23%	29%	70%	23%
Mass	99%		93%	96%	58%
Shoulder width	76%	99%		71%	12%
Pelvis width	31%	83%	60%		90%
Blood Pressure Systolic	7%	6%	22%	81%	

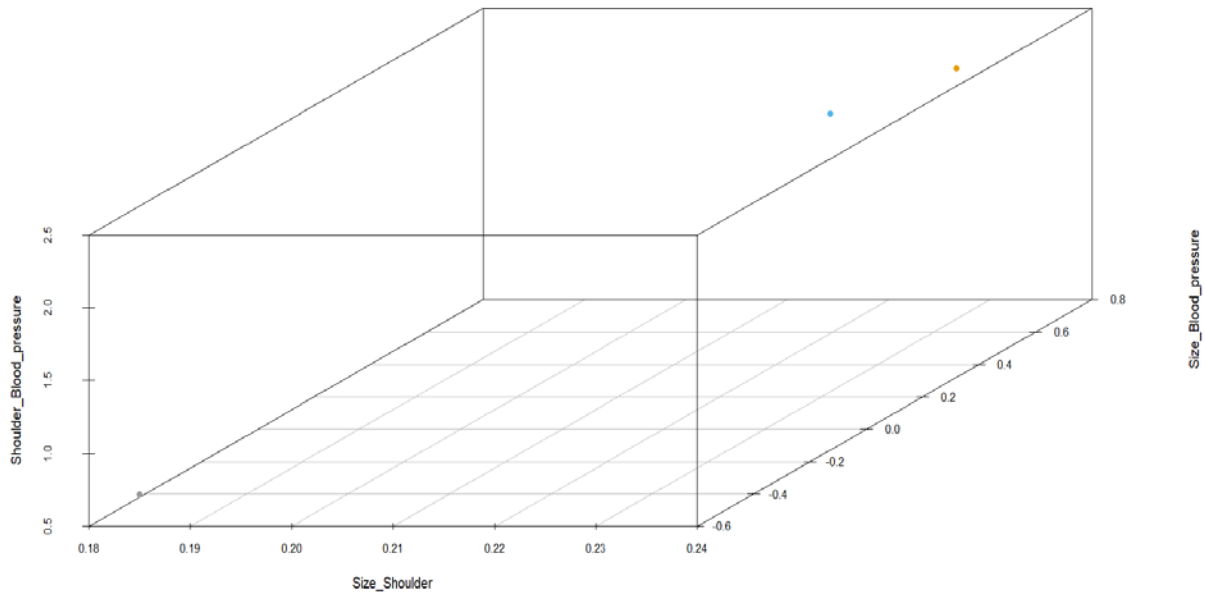
Table 3. likelihood of H0 (the Russian coefficient higher than Tuvan one)

Women (blue) / Men (red)	Body length	Mass	Shoulder width	Pelvis width	Blood Pressure Systolic
Body length		58%	81%	62%	94%
Mass	31%		10%	24%	95%
Shoulder width	95%	58%		17%	99%
Pelvis width	62%	42%	7%		39%
Blood Pressure Systolic	56%	71%	34%	9%	

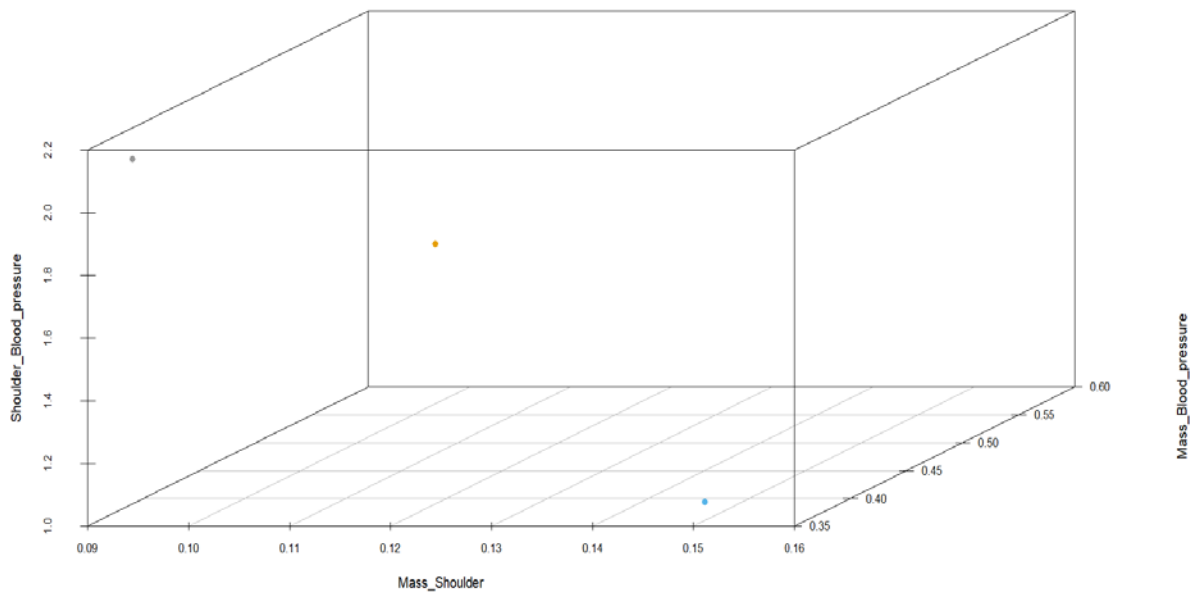
As we can observe on tables 2 and 3, in most of cases, coefficient for Russian group is not significantly higher than coefficient for Khakas or Tuvan groups. However, there are some exceptions as between Russian men and Khakas men for the correlation between Pelvis width and Mass or for Russian and Khakas women for Shoulder width and mass.

Also we can notice the following interesting fact. There is well-known dependency between blood pressure and body length: the longer the body, the higher the blood pressure. This dependency is obvious in groups Russian men/Tuvan men, but there isn't significant difference in groups Russian man/Khakas men despite the fact that this groups have larger difference of body length (Table 1).

About the Graph 1 and the Graph 2 presented above, we performed linear regression for measurements into the Tuvan group additionally to the Russian and the Khakass one despite the lack of observation in order to have a more general point of view regarding measurement links and ethnical groups. As we can observe, these two graphs also support the idea that the relation between measurements into each ethnical group is fundamentally different.



Pic. 2. 3D graph presenting regression parameters between Shoulder/Blood pressure, Size/Shoulder and Size/Blood pressure for Russian (orange), Khakass (blue) and Tuvan (grey) men respectively.



Pic. 3. 3D graph presenting regression parameters between Shoulder/Blood pressure, Size/Shoulder and Size/Blood pressure for Russian (orange), Khakass (blue) and Tuvan (grey) women respectively

Accordingly, it would be interesting to search in the theoretical framework to investigate the potential causes of such difference of relations between anthropometric measurement among ethnic groups.

Literature

1. Widyantia A. Ethnic differences in Indonesian anthropometry data: Evidence from three different largest ethnics / Ari Widyantia, Lusi Susantib, Iftikar Zahedi Sitalaksanaa, Khoirul Muslima // International Journal of Industrial Ergonomics — 2015 — V.47 P. 72-78.
2. Deurenberg-Yap M. Body fat measurement among Singaporean Chinese, Malays and Indians: a comparative study using a four-compartment model and different two-compartment models / Mabel Deurenberg-Yap, Gordon Schmidt, Wija A. van Staveren, Josep G. A. J. Hautvast, Paul Deurenberg // British Journal of Nutrition — 2001 — V.85(4):491-8.
3. Kagawa M. Body composition and anthropometry in Japanese and Australian Caucasian males and Japanese females / Masaharu Kagawa, Colin W. Binns, Andrew P. Hills // Asia Pac J Clin Nutr — 2007 — V.16(1) P.31-36.

ВЛИЯНИЕ СКОРОСТИ СВОБОДНОГО ДВИЖЕНИЯ НА РАСТЕКАНИЕ ЛЮДСКОГО ПОТОКА В ДЛИННОМ КОРИДОРЕ

Т. Б. Витова, Е. С. Кирик

Институт вычислительного моделирования СО РАН,

vitova@icm.krasn.ru, kirik@icm.krasn.ru

Работа посвящена исследованию движения людей и математическому моделированию процесса в условиях прямого коридора и открытых границ.

Растекание людского потока можно наблюдать при движении колонн людей, в метро, при выходе из зрелищных залов, спортивных сооружений и т. д. Растекание происходит тогда, когда головная часть потока, имея впереди свободный путь, увеличивает скорость движения до величины, соответствующей условиям свободного движения [1-2]. И весь поток, со временем, может идти со скоростью свободного движения при наличии места для распределения (растекания) людей по области движения.

На видеохостинге YouTube (<https://youtu.be/5fbd4kexrzv> «Тест на точность моделей эвакуации. Часть 1. Движение людских потоков.») представлена видеозапись постановочного эксперимента движения людского потока в коридоре 2 м на 20 м, рис. 1. Анализ видеозаписи показывает [3]: людской поток, состоящий из 20 человек, растекается примерно на 3,6 метров за время движения по данному участку пути.



Рис. 1. Постановочный эксперимент движения людей в спортивном зале.

Позиции людей через некоторое время после начала движения (слева) и когда головная часть потока достигла контрольной линии «5» (справа). В начальный

момент времени люди занимали первые пять метров области (до линии «1»)

Для наблюдения за процессом растекания необходимо, чтобы в эксперименте участвовало достаточное количество человек и путь движения был протяженным.

После начала движения людского потока происходит процесс перестроения – процесс выравнивания параметров движения (скорости и плотности потока) в различных частях потока [1-2]. Под плотностью людского потока имеется в виду плотность расположения людей: $\rho = \frac{N}{ab}$, $[1/m^2]$, где произведение ab – площадь области, в которой находятся люди (a – длина, b – ширина), N – количество людей в области. Если условия движения не меняются, то процесс переходит в установившийся режим.

Скорость движения человека зависит от многих факторов, как индивидуальных (возраст, пол, физическое и эмоциональное состояние), так и внешних (плотность людского потока, в котором движется человек) [1,2,4,5]. Скорость свободного движения – это скорость человека в отсутствии влияния окружающих людей.

В работе рассматривается влияние скорости свободного движения на растекание людского потока в длинном коридоре. Для исследований используется модуль SigmaEva из расчетно-аналитического комплекса «Сигма ПБ», в основе которого лежит дискретно-непрерывная модель движения людей [6,7].

Значение скорости свободного движения имеет ключевое значение в моделях движения людей, т. к. она ограничивает текущую скорость движения, и входит в аналитическое выражение зависимости скорости от плотности [2,4,5].

Дискретно-непрерывная модель движения людей

Движение людей (частиц) рассматривается на плоскости, пространство моделирования $\Omega \in R^2$. Геометрия пространства известна частицам и отражена в «карте местности» – поле расстояний S . Значения поля – кратчайшие расстояния от текущей точки до выхода. Частицы представляются в виде плоских круглых

несжимаемых дисков. В начальный момент времени t_0 их положение задаётся координатами центров дисков $x_i(0) = (x_i^1(0), x_i^2(0))$, $i = \overline{1, N}$, N – количество частиц. Каждой частице i приписывается: выход k и, соответственно, поле S_i^k , скорость свободного движения v_i^0 м/с, площадь горизонтальной проекции $P_i, \text{м}^2$.

В момент времени t частица может переместиться в одном направлении $e_i(t) \in \{e_i^\alpha(t), \alpha = \overline{1, q}\} = \left\{ \left(\cos 2\pi\alpha/q, \sin 2\pi\alpha/q \right), \alpha = \overline{1, q} \right\}$, q – количество возможных направлений, α – номер направления.

Направление движения частицы на каждом расчётном шаге – случайная величина. Пусть $p_i^\alpha(t)$ – вероятность сдвинуться в направлении $e_i^\alpha(t)$ для частицы i на шаге t . При вычислении $p_i^\alpha(t)$ учитывается поле расстояний до выхода S , плотность расположения частиц и близость стен в рассматриваемом направлении $e_i^\alpha(t)$. Влияние поля S , плотности частиц и стен контролируется соответствующими параметрами модели $k_S > 0$, $k_P > 0$, $k_W > 0$ в пределах радиуса видимости r . Параметры модели регулируют характер движения частиц, изменяя его от строго направленного к цели до случайного блуждания. На основе ряда распределения $p_i^\alpha(t)$ выбирается направление для перемещения $e_i^{\hat{\alpha}}(t)$, $\hat{\alpha}$ – номер выбранного направления.

Скорость свободного движения, площадь проекции частицы, другие параметры модели могут задаваться индивидуально для каждой частицы или быть одинаковыми для всех.

Новое положение частицы в момент времени t определяется как:

$$\mathbf{x}_i(t) = \mathbf{x}_i(t - \Delta t) + v_i(t) \mathbf{e}_i(t) \Delta t,$$

Δt – временной шаг и $\Delta t = 0,25$ с; $\mathbf{x}_i(t - \Delta t)$ – координата в предыдущий момент времени; $\mathbf{e}_i(t)$ – направление движения; $v_i(t)$ – скорость движения в направлении $\mathbf{e}_i(t)$.

Скорость движения на каждом временном шаге не может быть выше

заданной скорости свободного движения, зависит от плотности расположения частиц $\rho_i^{\hat{a}}(t)$ в направлении $e_i^{\hat{a}}(t)$ и определяется по заранее заданному закону [2,4,5]. Далее используется зависимость скорости от плотности с параметрами для горизонтального участка пути [2]:

$$v(\rho) = \begin{cases} v^0(1 - 0,295 \ln \frac{\rho}{0,51}), & \rho > 0,51; \\ v^0, & \rho \leq 0,51. \end{cases}$$

Результаты экспериментов

Расчётная область – прямой коридор $2 \times 110 \text{ м}^2$, в котором 20 частиц расположены на первых пяти метрах (берутся условия движения из видеозаписи постановочного эксперимента [3]). Горизонтальная площадь проекции частиц – $0,1 \text{ м}^2$ [2]. Граничные условия – открытые (частица при достижении границы удаляется из расчётной области). В [3] была определена скорость свободного движения в данном постановочном эксперименте. Исходя из этого, проведено три эксперимента:

1. Пяти частицам на фронте назначена скорость свободного движения $v_0^{\text{фронт}} = 1,16 \text{ м/с}$, всем остальным – $v_0^{\text{хвост}} = 1,3 \text{ м/с}$.

2. Всем частицам назначена $v^0 = 1,16 \text{ м/с}$.

3. Всем частицам назначена $v^0 = 1,3 \text{ м/с}$.

Для каждого набора условий проведено 20 экспериментов.

Для анализа движения используются три характеристики, с помощью которых можно отслеживать растекание потока.

Интенсивность движения или удельный поток: $J_s = N / Tb$, $[1/(\text{мс})]$, $N = 20$ – количество частиц, $b = 2 \text{ м}$ – ширина коридора, T – среднее время движения по участку пути. Вся расчётная область разделена на участки по $2,5 \text{ м}$. На рис. 2 представлено изменение интенсивности по мере продвижения частиц по коридору для различных скоростей свободного движения. Интенсивность движения снижается по мере продвижения людей по коридору из-за растекания и последующего разуплотнения потока.

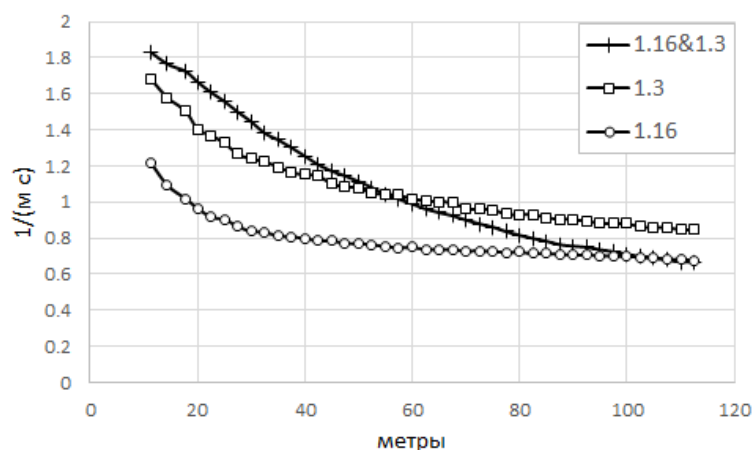


Рис. 2. Изменение интенсивности движения по участкам коридора для различных заданных скоростей свободного движения

Длина области, занимаемой частицами, в момент t – расстояние от первого до последнего участника движения. На рис. 3 показано изменение данной характеристики со временем. Длина области со временем увеличивается: за 80 секунд примерно в 3 раза. За это время частицы проходят 95 метров при $v^0=1,3$ м/с, 80 метров при $v^0=1,16$ м/с и 92,5 метров при неоднородной скорости (эксперимент 1).

Средняя скорость движения частиц в моменты времени $t - \sum_{i=1}^N v_i(t) / N$, рис. 4. Средняя скорость рассчитывается по всем участникам движения в момент времени t . Данная характеристика показывает, насколько скорость всех участников в потоке близка к заданной скорости свободного движения. Если характеристика близка к значению v^0 , тогда движение потока переходит в установившийся режим. На рис. 4 сплошные чёрные линии соответствуют скоростям свободного движения $v^0=1,3$ м/с и $v^0=1,16$ м/с для второго и третьего экспериментов. В начальный момент времени частицы расположены в области (2 м на 5 м) с плотностью 2 [1/м²], поэтому частицы в потоке не сразу начинают идти со скоростью свободного движения. Со временем, за счёт растекания все больше частиц реализуют заданную скоростью свободного движения.

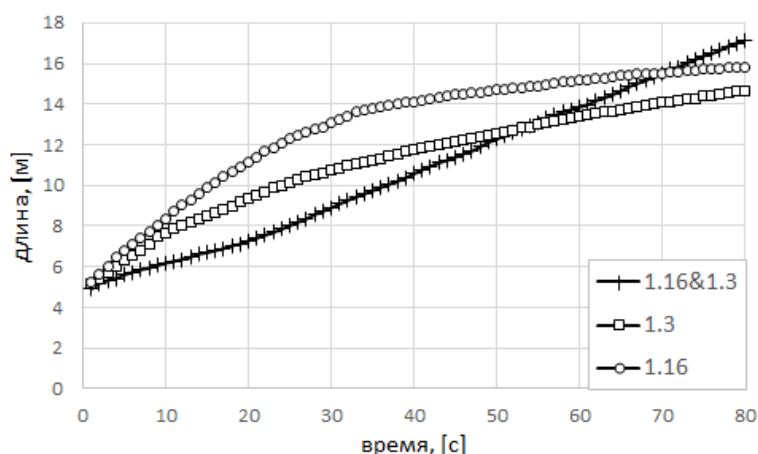


Рис. 3. Длина области, занимаемой людьми, в зависимости от времени движения для различных заданных скоростей свободного движения

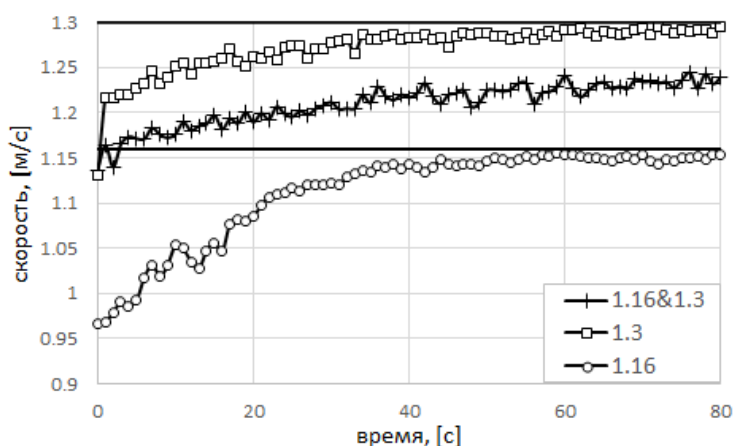


Рис. 4. Изменение средней скорости движения от времени для различных заданных скоростей свободного движения. Прямые соответствуют скоростям свободного движения $v^0 = 1,3$ м/с и $v^0 = 1,16$ м/с

При однородной скорости свободного движения для всех частиц в потоке (эксперименты 2 и 3) растекание потока постепенно замедляется. Графики постепенно перестают изменяться, что может свидетельствовать о переходе на установившийся режим движения. При неоднородных скоростях выхода на установившийся режим не происходит. Во втором эксперименте ($v^0 = 1,16$ м/с) выход на установившийся режим движения происходит раньше, чем в третьем. Чем ниже заданная v^0 , тем быстрее наступает установившийся режим.

Заключение

С помощью дискретно-непрерывной модели движения людей

промоделирован процесс движения людей в прямом коридоре при открытых граничных условиях. Найдены интенсивность движения по участкам коридора, длина области, занимаемой людьми, и скорость движения. Данные характеристики используются для анализа движения. Установлено, что за счёт растекания интенсивность движения снижается по мере продвижения частиц по коридору. Длина области, занимаемой людьми, со временем увеличивается примерно в 3 раза. При однородной скорости свободного движения для всех частиц в потоке растекание потока постепенно замедляется. Чем ниже скорость свободного движения, тем быстрее наступает установившийся режим. При неоднородных скоростях процесс движения не переходит в установившийся режим, поток растекается постоянно.

В первом вычислительном эксперименте на участке длиной 20 метров наблюдалось движение близкое к постановочному эксперименту (<https://youtu.be/5fbd4kexrzw> «Тест на точность моделей эвакуации. Часть 1. Движение людских потоков.»), отклонение времени движения не более 6% [3].

Список литературы

1. Предтеченский В. М. Проектирование зданий с учётом организации движения людских потоков: учебное пособие для вузов / В. М. Предтеченский, А. И. Милинский – М. Стройиздат, 1972. – 375 с.
2. Холщевников В. В. Эвакуация и поведение людей при пожарах: учебное пособие / В. В. Холщевников, Д. А. Самошин, А. П. Парфененко, И. С. Кудрин, Р. Н. Истратов, И. Р. Белосохов. – М.: Академия ГПС МЧС России, 2015. – 262 с.
3. Кирик Е. С. Анализ данных натурных экспериментов пешеходного движения в прямом коридоре и их применение для тестирования программ на примере ПО «Сигма ПБ» / Е. С. Кирик, Т. Б. Витова // Пожарная безопасность. – 2020. – № 1. – С. 51-62.
4. Weidmann U. Transporttechnik der Fussganger. Transporttechnische Eigenschaften des Fussgangerverkehrs (Literaturauswertung)/ U. Weidmann. – Zurich: IVT,

- Institut fur Verkehrsplanung, Transporttechnik, Strassenund Eisenbahnbau, 1992. – 110 p.
5. Nelson H. E. Emergency Movement / H. E. Nelson, F. W. Mowrer // The SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. – National Fire Protection Association. 2002. – P. 3-367 – 3-380.
 6. Кирик Е. С. Математическое моделирование эвакуации при пожаре / Е. С. Кирик, А. А. Дектерев, К. Ю. Литвинцев, Е. Б. Харламов, А. В. Малышев // Математическое моделирование. – 2014. – Т. 26, № 1. – С. 3-16.
 7. Kirik E. On the evacuation module SigmaEva based on a discrete-continuous pedestrian dynamics model / E. Kirik, A. Malyshev, M. Senashova // Lecture Notes in Computer Science, Proceedings of the 11th International conference “Parallel processing and applied mathematics”. – 2016. – V.9574. – P.539-549.

ТЕРМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА ИЗ ГАЗОВОЙ СРЕДЫ НАНОЧАСТИЦ Cu-Au²

Ю.Я. Гафнер, Д.А. Рыжкова

Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова,

bashkova.daria@yandex.ru

1. Введение

Синтез из газовой среды считается наиболее экономически привлекательным методом создания наноструктурированных материалов в промышленных масштабах, подходящим для подавляющего большинства химических элементов и соединений. Несомненным его преимуществом является достаточно хороший контроль параметров экспериментальных установок и относительная простота производства в сравнении с традиционными химическими способами. В последние десятилетия значительный прогресс был достигнут в развитии различных вариантов такого синтеза, изучении лежащих в его основе физических и химических процессов и определении свойств, получаемых наночастиц и ультрадисперсных нанопорошков [1-6].

Параллельно реальным экспериментам были проведены и имитационные опыты по анализу особенностей, имеющихся как на атомном уровне, так и на уровне уже сформированного первичного наноматериала. В этом случае для оценки динамических процессов образования и роста наночастиц применялись методики *ab initio* вычислений или молекулярной динамики. Полученные при моделировании знания могли использоваться далее для внесения изменений в технологию проведения синтеза или даже в конструкцию установок.

Характерной особенностью конденсации из газовой среды является то, что объемные прекурсоры, находящиеся в высокотемпературном состоянии, переводятся в фазу метастабильного перенасыщенного газа, что и ведет к образованию и росту наночастиц. При этом исходный атомный пар, даже в

² Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-29-20018, <https://rscf.ru/project/22-29-20018/> при паритетной финансовой поддержке Правительства Республики Хакасии.

случае бинарной смеси, наблюдается в однородном гомогенном состоянии, а не является нанокомпозитом с каким-либо заданным составом. Именно поэтому при газофазном синтезе, в противоположность к химическим методиками, наблюдается практически полный контроль целевой композиции получаемого наноматериала.

В представленной работе мы рассмотрим лишь некоторые моменты процесса формирования наночастиц из высокотемпературной газовой среды на примере модельной системы содержащей атомы двух химических элементов Cu и Au. На основе полученных в ходе проведенного компьютерного эксперимента результатов будут сделаны выводы о возможных механизмах синтеза бинарных наночастиц Cu-Au и проведен общий анализ моделируемой системы на разных этапах ее эволюции.

2. Компьютерная модель

Одним из простейших методов газофазного синтеза является испарение прекурсоров в атмосфере холодного инертного газа, обычно He или Ar с малой плотностью (давление порядка 1 mbar). Конвекционный поток инертного газа проходит через зону испарения прекурсоров и переносит испаренное вещество в направлении собирающих фильтров или подложек. Стенки реакторной зоны охлаждаются жидким азотом, водой или другим веществом в зависимости от того, какую скорость отвода тепловой энергии требуется создать.

В применяемом нами при имитации подобного газофазного синтеза методе молекулярной динамики, базовым считается микроканонический или *NVE* ансамбль. Однако такой стандартный подход хорошо применим только для однородной системы, имея ряд ограничений при наличии фазовых изменений. Так, если рассматривать образование конденсационного зародыша из атомного пара, то вследствие объединения атомов между собой в димеры, тримеры и т.д., выделяемая при этом потенциальная энергия переходит в кинетическую, что ведет к резкому увеличению температуры в камере синтеза [1].

Если не принять никаких мер по выводу термической энергии из системы,

то произойдет неконтролируемый рост скорости атомов зародыша, вновь приводящий к его испарению. Следовательно, выделяющееся при соединении в кластерные фрагменты тепло, должно быть каким-либо образом удалено из ячейки моделирования, для чего используют различного рода термостаты.

В нашем случае для охлаждения бинарного атомного пара был применен термостат Андерсена с неизменной скоростью отвода тепловой энергии (NVT ансамбль). Созданная для проведения численного эксперимента область имела правильную кубическую форму с длиной грани в 1350 Боровских радиуса a_B с наличием периодических граничных условий и содержала суммарно 91124 атомов меди и золота, равномерно распределенных в пространстве со средним расстоянием между ними в 30 Боровских радиусов.

Инертный газ, создаваемый термостатом Андерсена и отводящий термическую энергию от основной газовой бинарной смеси, имел температуру 77 К, что моделировало достаточно стандартную ситуацию охлаждения системы жидким азотом. Уравнения движения атомов решались на основе скоростной схемы Верле с шагом интегрирования $h = 1$ фс. Выбор расстояния между атомами (начальная плотность) определялся поставленными в эксперименте задачами. Если необходимо получить на выходе установки лишь частицы малого размера, то в камере синтеза начальная плотность металлического пара должна быть много меньше плотности инертного газа. Подобное моделирование имитирует ситуацию в ударной трубе (*shock tube*), в которой молекулы металла на начальном этапе в значительной мере разбавляются атмосферой инертного газа.

3. Результаты и обсуждение

Кинетика взаимодействия атомов прекурсоров и процессы начального формирования наночастиц сильно зависят от температуры. Изменения температуры в камере синтеза являются одной из важнейших величин, характеризующих эволюцию всей системы в целом. Температура незаменима в качестве входного и контрольного параметра для реалистичного моделирования,

включающего сильно зависящую от температуры химическую кинетику. Однако, когда механизмы газофазных взаимодействий, полученные в результате экспериментов в разреженных атмосферах, начинают применяться к синтезирующим реакторам, то часто обнаруживаются сильные отличия, указывающие на важность гетерогенных реакций, в которых прекурсоры или ранние промежуточные продукты взаимодействуют с большой и высокореактивной площадью поверхности свежегенерированной наночастицы. Но из-за экспериментальной сложности изучения таких процессов в теоретическом базисе газофазного производства наночастиц имеется серьезный недостаток информации.

Так как нас интересуют процессы, происходящие на самых ранних стадиях формирования частиц, то было рассмотрено поведение системы на временном интервале до 10.0 нс. Прежде всего, проанализируем термическое развитие моделируемой области.

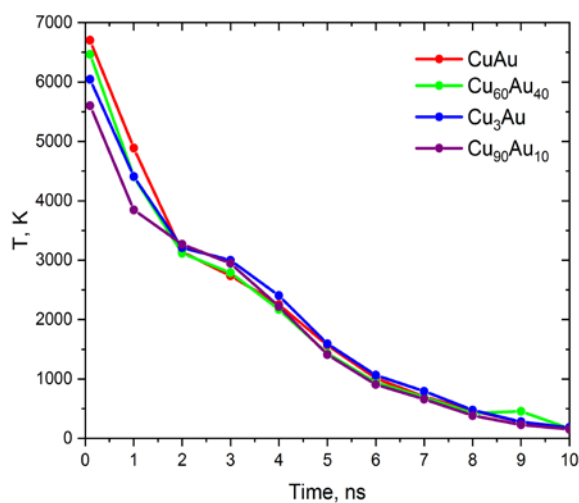


Рис. 1. Зависимость температуры модельной системы Cu-Au разного целевого состава от времени моделирования.

Первоначальная температура составляла 1000 К для всех имитируемых нами целевых химических составов, но уже при 0.1 нс наблюдалось существенное различие по этому очень важному показателю. Так для Cu₉₀Au₁₀

она была минимальной и составляла 5600 К, с ростом процентного содержания атомов золота в исходной газовой среде температура плавно росла, достигая максимального значения $T = 6700$ К для целевого состава с наибольшим моделируемым содержанием золота (CuAu). То есть увеличение в бинарной системе атомов золота на 1% при выбранном нами модельном числе атомов соответствовало повышению температуры системы примерно на 27.5 К (рис. 1).

Данный результат является прямым следствием того факта, что при образовании одного димера золота дополнительно выделяется 0.32 эВ энергии, по отношению к формированию Cu димера, что, частично, и приводит к наблюдаемому нами росту температуры модельной системы.

Будем считать полученную нами пропорцию изменения температуры стандартной, так как она описывает два предельных случая: наименьшей и наибольшей имитируемой концентрации атомов золота. Для проверки этого предположения приведем данные, полученные нами для случая конденсации чистой меди при схожих условиях компьютерного эксперимента. Здесь при времени моделирования $t = 0.1$ нс температура системы аналогичного размера составила примерно 5320 К, что укладывается в найденную нами зависимость.

Несомненно, что из-за случайного характера процесса образования димеров, тримеров и более крупных кластерных фрагментов формирование связей Au-Au, Au-Cu или Cu-Cu происходит стохастически, из-за чего при других моделируемых целевых составах ($\text{Cu}_{75}\text{Au}_{25}$, $\text{Cu}_{60}\text{Au}_{40}$) наблюдались некоторые отклонения, но в целом найденная пропорция соблюдалась в пределах 10% погрешности. Данная тенденция сохраняется до времени $t = 1.0$ нс из-за чего этот временной интервал можно рассматривать как первый этап общий эволюции бинарной системы Cu-Au. Если анализировать «мгновенные» снимки модельной области при разных имитируемых нами целевых составах, то различия между случаем $t = 0.1$ нс и $t = 1.0$ нс практически нет. Везде наблюдается картина хаотического распределения единичных атомов Cu и Au, а также их очень мелких образований. Но при $t = 1.0$ нс температура во всех модельных системах благодаря взаимодействию с холодным транспортным газом

(термостат Андерсена) падает примерно на 1800-2000 К, что вносит решающий вклад в процессы дальнейшего развития бинарной газовой среды.

Кроме этого в ряде работ было замечено, что первоначально однородный химический состав частицы, соответствующий строению L_{12} , начинает изменяться вследствие процесса вытеснения атомов Au в поверхностный слой, причем скорость процесса сегрегации ожидаемо увеличивается с температурой, что подтверждается и экспериментально. Поэтому можно заключить, что процессы атомного перемешивания и разделения определяются многими факторами. Это и минимизация поверхностной энергии, уменьшение внутренних напряжений, эффективность атомной упаковки и наличие определенной структуры, что может сделать более энергетически выгодным Au-Au или Au-Cu взаимодействия. Данный результат является прямым следствием того, что объемная энергия связи выбранных нами химических элементов и их соединений изменяется в следующем порядке: Au -3.81 эВ > CuAu₃ -3.75 эВ > CuAu -3.74 эВ > Cu₃Au -3.64 эВ > Cu -3.49 эВ, что и приводит к наблюдаемому нами росту температуры модельной системы.

4. Заключение

Несмотря на достигнутый в последние годы прогресс в синтезе наноматериала из газовой среды, обеспеченный как эмпирическими способами, так и теоретическими методами исследования, в будущем еще предстоит изучить широкий круг вопросов данной проблематики. И здесь особое внимание должно быть уделено процессам, происходящим на начальном этапе, то есть в высокотемпературной фазе. Для понимания этого требуется, прежде всего, наличие большого набора термодинамических и кинетических данных, которые далеко не всегда могут быть представлены экспериментально, из-за чего большие надежды возлагаются именно на компьютерное моделирование.

Газофазный синтез имеет ряд очень важных преимуществ, по отношению к другим методикам. Многообещающей выглядит возможность прямого, одноступенчатого формирования сложных материалов с необходимым

химическим составом, определенной кристаллической структуры и формы. Однако для этого необходимо детальное изучение особенностей поведения малых кластерных фрагментов, процессов объединения зародышей и возможной реорганизации внутреннего и внешнего строения.

Список литературы

1. Kato, S. Gas-Phase Synthesis of Morphology-Controlled Pt Nanoparticles and Their Impact on Cinnamaldehyde Hydrogenation / S. Kato, J. Ohyama, M. Machida, A. Satsuma // *Catalysis Science and Technology Journal*. – 2019. – V. 9. – P. 2097-2102. – DOI: 10.1039/C9CY00158A
2. Starsich, F.H.L. Gas-phase synthesis of magnetic metal/polymer nanocomposites / F.H.L. Starsich, A.M. Hirt, W.J. Stark, R.N. Grass // *Nanotechnology*. – 2014. – V. 25. – Art. № 505602. – DOI: 10.1088/0957-4484/25/50/505602
3. Zhao, L. Gas-phase synthesis of benzene via the propargyl radical self-reaction / L. Zhao, W. Lu, M. Ahmed, M.V. Zagidullin, V.N. Azyazov, et.al. // *Science Advances*. – 2021. – V. 7. – Art. № eabf0360. – DOI: 10.1126/sciadv.abf0360
4. Deepak, F.L. Gas-phase synthesis of inorganic fullerene-like structures and inorganic nanotubes / F. L. Deepak, R. Tenne // *Central European Journal of Chemistry*. – 2008. – V. 6(3). – P. 373–389. – DOI: 10.2478/s11532-008-0043-2
5. Arbeláez-Pérez, O. F. Gas phase synthesis of dimethyl carbonate from CO₂ and CH₃OH over Cu-Ni/AC. A kinetic study / O. F. Arbeláez-Pérez, S.D. Cardozo, A.F. Orrego-Romero, A.L.V. Holguín, F.B. Londoño // *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*. – 2020. – I. 95. – P. 88-99. – DOI: 10.17533/udea.redin.20190941
6. Snellman, M. Continuous gas-phase synthesis of core-shell nanoparticles via surface segregation / M. Snellman, N. Eom, M. Ek, M.E. Messing, K. Deppert // *Nanoscale Advances*. – 2021. – V. 3. – P. 3041-3052. – DOI: 10.1039/D0NA01061H

ОЦЕНКА ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА НАНОКЛАСТЕРОВ Cu-Au ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ СИНТЕЗА ИЗ ГАЗОВОЙ СРЕДЫ³

С.Л. Гафнер, Д.А. Рыжкова, Ю.Я. Гафнер

Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова,

bashkova.daria@yandex.ru

1. Введение

В отличие от химических методов синтеза, при производстве наночастиц из газовой среды сильное влияние на процесс оказывают термодинамические и кинетические факторы, конкурирующие между собой при сверхбыстром охлаждении исходного пара в реакционной зоне. В результате этого часто удается получать метастабильные, по отношению к целевому химическому составу или кристаллической структуре, состояния. При данном подходе наночастицы не помещаются в оболочку из лигандов и не «загрязняются» иными продуктами химических реакций, что позволяет с большей наглядностью исследовать основные процессы нуклеации и роста. Кроме того, процесс газофазного синтеза можно условно считать непрерывным. Так при химическом методе формирование наночастиц ограничивается стадией получения термодинамически устойчивых состояний, обычно строго определенного среднего размера, но в случае синтеза из газовой среды, изменяя динамические потоки, можно получить наночастицы в очень широком диапазоне размеров.

Эффективным при исследовании влияния технологических параметров на размер, форму и химическую композицию наноматериалов, в процессе их синтеза различными методиками, может стать компьютерное моделирование. Очевидно, что модель, позволяющая качественно и количественно оценить процесс формирования наночастиц, должна довольно точно коррелироваться с данными спектроскопии, электронной микроскопии и законами фундаментальной физико-химической кинетики [1–3].

³ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-48-190002). Гафнер Ю.Я. также благодарит НОЦ «Енисейская Сибирь» за помощь в проведении исследований.

Целью данной работы является анализ методами компьютерного моделирования одной из проблем производства бинарных наночастиц Cu-Au в процессе высокотемпературного газофазного синтеза: их целевого состава. Планируется сделать выводы об особенностях формирования таких частиц, их реальном химическом составе, а также объяснить основные механизмы образования бинарных наночастиц Cu-Au при осаждении из газовой среды. Подробное исследование зависимости процессов атомного упорядочения частиц Cu-Au от концентрации атомов золота в модельной среде впервые производится на основе достаточно сложного для моделирования больших систем многочастичного потенциала сильной связи.

2. Компьютерная модель

В качестве базы для построения компьютерной модели синтеза из газовой фазы была взята экспериментальная установка, используемая в Институте ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН (г. Новосибирск). В данной установке для реализации высокотемпературных химических реакций применяют мощный пучок электронов, обладающих энергией на «релятивистском» уровне. Источником электронов является промышленный ускоритель непрерывного действия с энергией 1,4 МэВ. Электроны в нем движутся с релятивистскими скоростями, и длина их свободного пробега в воздухе доходит до 6 метров. Концентрация мощности может достигать 5 МВт/см², что позволяет переводить в газовую фазу любые тугоплавкие вещества.

Экспериментальный анализ происходящих при этом процессов является довольно затруднительным, т.к. что реакции формирования частиц происходят, как правило, в наносекундном интервале времени, а размеры объединяющихся начальных фрагментов лежат в нанометровом диапазоне. При этом теоретическое описание процесса конденсации также представляет собой сложную задачу, потому что формирование частиц происходит в неравновесных условиях с зависимостью физико-химических свойств от размера наночастицы.

Работ по компьютерному анализу процессов формирования наночастиц

посредством газофазного синтеза известно очень мало, что обусловлено сложностью протекающих реакций. Нами применяется собственная методика компьютерной имитации формирования нанокластеров из высокотемпературной газовой среды, позволяющая с большой степенью достоверности прогнозировать возможные результаты синтеза.

Анализ процессов, происходящих при совместной конденсации атомов золота и меди, был проведен при помощи метода молекулярной динамики (МД) на основе модифицированного потенциала сильной связи TB-SMA [4]. Моделируемая область имела кубическую форму с длиной грани в 1350 Боровских радиуса и содержала суммарно 91124 атомов меди и золота, равномерно распределенных по объему. Начальная температура системы составляла $T_i = 1000$ К, что соответствует стадии транспортировки атомов испаренных веществ буферным газом в камеру синтеза. Уравнения движения атомов решались на основе скоростного алгоритма Верле с шагом интегрирования $h = 1$ фс. Для охлаждения газовой смеси до температуры жидкого азота ($T = 77$ К) применялся термостат Андерсена с фиксированным темпом отвода тепловой энергии. Более подробно о методике проведенного моделирования изложено в работах [5, 6].

3. Результаты и обсуждение

Как правило, бинарные наночастицы создаются путем смешивания прекурсоров в определенной пропорции. Однако в этом случае имеет место высокая неоднородность состава конечных наночастиц. Об этом свидетельствуют, например, данные [7] по химическому получению наночастиц с целевым составом Au_3Cu и AuCu_3 . Так для наночастиц Au_3Cu отмечается хаотичное процентное содержания атомов меди, без наличия явной зависимости от размера: содержание Cu изменялось от 6 до 23 ат.% для бинарных частиц размером до 8 нм со средним процентным составом равным 11 ± 3 ат.% Cu. Для второго целевого соотношения AuCu_3 также не удалось установить четкую зависимость между размером и составом. Наночастицы оказались значительно

обогащены золотом, по сравнению с номинальным составом прекурсоров: найденная химическая композиция была между 8 и 19 ат.% Cu со средним содержанием 12 ± 2 ат.% Cu для наночастиц с размером до 26 нм. На основе полученных данных был сделан достаточно неожиданный вывод о том, что содержание меди в наночастицах Cu-Au, вероятно ограничено величиной 11–12 ат.% Cu, и независимо от реального первичного состава прекурсоров, конечная композиция полученных химическим способом наночастиц всегда близок к Au_8Cu .

Объяснить результат, полученный в работе [7], можно на основе кинетики реакций в наночастицах Cu-Au. Для синтеза соединений использовались типичные реакции следующего вида $\text{Au}(\text{aq})^{3+} + 3\text{e}^- \rightarrow \text{Au}(\text{s})^0$ и $\text{Cu}(\text{aq})^{2+} + 2\text{e}^- \rightarrow \text{Cu}(\text{s})^0$. Для первой реакции окислительно-восстановительный потенциал ($\text{Au}^{3+} / \text{Au}$) составляет +1.50 В. Для реакции восстановления ионов Cu соответствующий потенциал ($\text{Cu}^{2+} / \text{Cu}$) равен +0.34 В. Окислительно-восстановительный потенциал восстановления ионов $\text{Au}(\text{III})$ выше, чем у ионов $\text{Cu}(\text{II})$, поэтому ионы золота легче восстанавливаются в металлическом $\text{Au}(0)$, чем ионы меди в металлическом $\text{Cu}(0)$. Таким образом, сверхмалые нанокластеры золота могут образовываться еще до полного восстановления ионов меди, что объясняет трудности в формировании бинарного сплава золота и меди определенного целевого состава в условиях химического синтеза с данными прекурсорами. В свою очередь, оставшиеся неиспользованными в реакциях атомы меди формируют малые наночастицы Cu, что фиксируется экспериментально [7].

Проблема невозможности производства наночастиц Cu-Au с требуемым целевым составом химическими методами можно решить, используя физические методы синтеза. Рассмотрим следующие теоретические и экспериментальные работы. В [8] при помощи МД моделирования на основе bond-order потенциала анализировались особенности синтеза из газовой среды наночастиц SiC_2 . Исследование проводилось при вариации начальной плотности атомного пара и

показало, что на финальной стадии частицы в основном имели стехиометрический состав. В работе [7] наночастицы Cu-Au были экспериментально получены при помощи лазерной депозиции на графитовую подложку. Анализ спектров показал среднее содержание атомов меди 20 ± 1 ат.% в образце с целевым составом Au_3Cu и 73 ± 3 ат.% в образце с целевым составом AuCu_3 . При этом была достигнута очень малая дисперсия значений средних параметров кристаллической решетки Cu-Au, что говорит о высокой однородности в составе бинарных наночастиц.

Основной задачей данной работы было определение влияния исходного содержания атомов золота в газовой среде на реальный химический состав синтезируемых наночастиц Cu-Au. Данный вопрос имеет большое значение для проблематики получения наночастиц с требуемым процентным содержанием того или иного химического элемента. На рисунке 1 представлены данные, полученные в ходе компьютерного МД моделирования процесса синтеза наночастиц Cu-Au из газовой среды относительно процентного содержания атомов меди в сформированных по данной методике кластерах с целевыми составами $\text{Cu}_{50}\text{Au}_{50}$, $\text{Cu}_{60}\text{Au}_{40}$, $\text{Cu}_{75}\text{Au}_{25}$ и $\text{Cu}_{90}\text{Au}_{10}$. Анализ результатов показывает достаточно близкое содержание атомов меди к требуемым по условиям эксперимента значениям: 46,50 ат.% для целевого состава 50% (отклонение 3,50%), 57,87 ат.% для целевого состава 60% (отклонение 2,13%), 71,59 ат.% для целевого состава 75% (отклонение 3,41%) и 89,81 ат.% для целевого состава 90% (отклонение 0,19%). Так же можно видеть, что приведенные данные компьютерного эксперимента по синтезу бинарных наночастиц Cu-Au из газовой среды согласуются с результатами экспериментальной работой [7] для случая Cu_3Au (73 ± 3 ат.%).

Однако явной зависимости между процентным содержанием атомов меди в исходной паровой среде и в конечных кластерах все же обнаружить не удалось. Но было найдено, что максимальные отклонения от требуемого по условию эксперимента целевого состава были зафиксированы для Cu-Au кластеров стехиометрических составов CuAu и Cu_3Au . На наш взгляд, причиной такого

неожиданного результата стало кристаллическое строение полученных при моделировании наночастиц. Известно, что при относительно малых температурах макроскопические сплавы Cu-Au образуют тетрагональную сверхструктуру $L1_0$ для стехиометрии CuAu и кубическую сверхструктуру $L1_2$ для стехиометрии Cu_3Au . А сплавы с химическими составами $Cu_{60}Au_{40}$ и $Cu_{90}Au_{10}$ таким строением не обладают. Вероятно, именно данный факт играет ключевую роль в объяснении результатов проведенного компьютерного анализа.

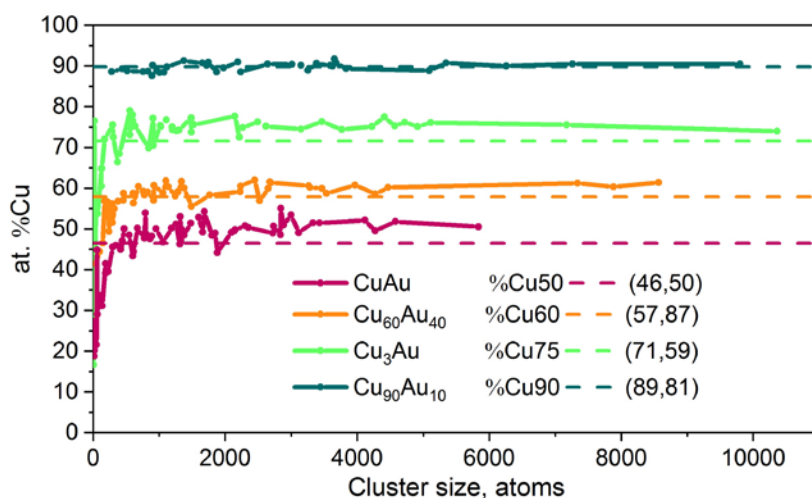


Рис. 1. График зависимости процентного содержания меди в Cu-Au наночастицах при различной химической композиции исходной газовой смеси (анализ проведен на конечной стадии моделирования). Пунктирными линиями показано среднее содержание атомов меди в наночастиц при различных целевых составах.

4. Заключение

Синтез из газовой фазы имеет много преимуществ и является одним из основных физических методов получения нанопорошков. Например, при использовании лазера излучение должно иметь определенную длину волны, чтобы реализовывалось его поглощение конкретным веществом, однако образующиеся пары зачастую препятствуют прохождению лазерного луча к поверхности исходного вещества, что уменьшает эффективность испарения. В случае же газофазного синтеза «оптические» не влияют на «доставку» энергии в

испаряемое вещество. Кроме того, прямое преобразование электрической энергии в тепловую и «химическая чистота» пучка обеспечивают высокий КПД процесса.

В представленной работе методом компьютерного МД моделирования был проанализирован ряд аспектов такого газофазного синтеза относительно бинарной системы Cu-Au различного целевого состава. На основе результатов численного моделирования можно сделать вывод о том, что кластеры с размером более 400–500 атомов, независимо от химического состава исходной газовой смеси, в основном придерживаются заданного химического соотношения (максимальные отклонения от него ($\approx 3,5\%$) фиксировались у атомного пара стехиометрического состава). При этом при уменьшении процентного содержания атомов золота в исходном паре снижается и величина отклонения кластеров от заданного целевого состава.

Список литературы

1. Schulz, C. Gas-phase synthesis of functional nanomaterials: Challenges to kinetics, diagnostics, and process development / C. Schulz, T. Dreier, M. Fikri, H. Wiggers // Proceedings of the Combustion Institute. – 2019. – V. 37. – I. 1. – P. 83-108. DOI: 10.1016/j.proci.2018.06.231
2. Mustonen, K. Gas phase synthesis of non-bundled, small diameter single-walled carbon nanotubes with near-armchair chiralities / K. Mustonen, P. Laiho, A. Kaskela, Z. Zhu, O. Reynaud, et.al. // Applied Physics Letters. – 2015. – V. 107. – Art. № 013106. DOI: 10.1063/1.4926415
3. Feng, J. Toward industrial scale synthesis of ultrapure singlet nanoparticles with controllable sizes in a continuous gas-phase process / J. Feng, G. Biskos, A. Schmidt-Ott // Scientific Reports. – 2015. – V. 5. – Art. № 15788. DOI: 10.1038/srep15788
4. Cleri, F. Tight binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato // Physical Review B. – 1993. – V. 48. – I. 1. – P. 22-33. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.22
5. Гафнер, Ю.Я. Некоторые новые результаты моделирования процессов

- газофазного синтеза наночастиц Cu-Au / Ю.Я. Гафнер, С.Л. Гафнер, Ю.А. Куликова // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2020. – В. 12. – С. 384-393. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.384
6. Gafner, Yu.Ya The role of gold atom concentration in the processes of formation of Cu-Au nanoparticles from the gas phase / Yu.Ya. Gafner, S.L. Gafner, D.A. Ryzkova, A.V. Nomoev // Beilstein Journal of Nanotechnology. – 2021. – V. 12. – P.72-81. DOI:10.3762/bxiv.2020.88.v1
7. Prunier, H. New insights into the mixing of gold and copper in a nanoparticle from a structural study of Au-Cu nanoalloys synthesized via a wet chemistry method and pulsed laser deposition / H. Prunier, J. Nelayah, Ch. Ricolleau, G. Wang, S. Nowak et.al // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2015. – V.17. – P. 28339-28346. DOI: 10.1039/c5cp01491c
8. Erhart, P. Molecular Dynamics Simulations of Gas Phase Condensation of Silicon Carbide Nanoparticles / P. Erhart, K. Albe // Advanced Engineering Materials. – 2005. – V.7. – P. 937-945. DOI: 10.1002/adem.200500119

РОЛЬ АТОМОВ ЗОЛОТА ПРИ ФОРМИРОВАНИИ МОРФОЛОГИИ НАНОКЛАСТЕРОВ Cu-Au В СЛУЧАЕ ГАЗОФАЗНОГО СИНТЕЗА⁴

Ю.Я. Гафнер, Д.А. Рыжкова¹, С.Л. Гафнер

Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова,

¹*bashkova.daria@yandex.ru*

1. Введение

Благодаря способности существенно изменять физико-химические свойства промышленных материалов, наночастицы находят широкое применение в различных технических областях. Например, температура плавления, магнитные и электронные свойства могут варьироваться в зависимости от внутреннего строения используемых наночастиц. Нанообъекты, форма которых, характеризуется большим соотношением площади поверхности к объему, чрезвычайно востребованы при катализе химических реакций. А для наночастиц, используемых в термоэлектронных устройствах, необходима высокая плотность фазовых границ и т.д. В связи с этим, перспективной областью фундаментальных исследований является синтез наночастиц из газовой среды, так как он обладает высоким производственным потенциалом, сопряженным со значительной вариативностью внутренней структуры получаемых наночастиц (аморфной, кристаллической, полиморфной, кинетически или термодинамически стабильной), а также широким спектром их внешних форм [1].

Для полного раскрытия потенциала методики газофазного синтеза необходимо фундаментальное исследование особенностей формирования и роста частиц, процессов образования их внутренней структуры, роли кинетических и термодинамических факторов, что невозможно сделать, опираясь только на обычные эмпирические исследования. Необходимо определение реальной кинетики происходящих реакций, обусловленное плотностью исходного атомного пара, скоростью течения буферного газа, теплового профиля системы и

⁴ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-48-190002). Гафнер Ю.Я. также благодарит НОЦ «Енисейская Сибирь» за помощь в проведении исследований.

других технологических особенностей, наблюдаемых в камере синтеза [1].

Для систем, требующих более одного газового прекурсора, морфология конечного продукта зависит от реакционной кинетики между атомами различных химических элементов. Это приводит к формированию гомогенных смешанных систем или нанокомпозитов, представляющих собой огромный технологический интерес. В процессе синтеза обычно используют несколько металлических прекурсоров, характеризующихся различной способностью смешиваться, что приводит к образованию наночастиц самого разного вида: смешанного состава, Янус-подобных, ядро-оболочечных и т.д.

Целью данной работы является молекулярно-динамическое исследование синтеза бинарных металлических наночастиц из высокотемпературной газовой фазы с использованием в качестве прекурсоров образцов меди и золота в различных процентных соотношениях, а именно изучение особенностей внутреннего строения синтезированных частиц и их возможной кристаллической структуры.

2. Компьютерная модель

В качестве основы численного анализа применялся стандартный метод молекулярной динамики (МД), позволяющий имитировать поведение модельной системы с высокой точностью на временном промежутке до десятков наносекунд даже в случае ансамбля из нескольких тысяч атомов. Для оценки межатомного взаимодействия был использован подход на основе модифицированного потенциала сильной связи TB-SMA [2] с радиусом взаимодействия до пятой координационной сферы включительно. Выбор данного потенциала был обусловлен несколькими причинами. Так на основе проведенных ранее расчетов, как в нашей группе, так и другими авторами [3], применение EAM потенциала (метод погруженного атома) в данном случае не позволяет получить правильную картину как основных нуклеационных процессов, так и процессов дальнейшей термической эволюции сформированных наночастиц. Конечно, при анализе макроскопических систем или наночастиц большого размера такой способ

построения потенциальной энергии ансамбля взаимодействующих атомов способен дать достаточно корректные результаты, но во время имитации поведения сверхмалых нанокластеров, полученных на самых ранних стадиях газофазного синтеза (стадия нуклеации), лежащая в его основе схема перестает быть физически корректной. В этом случае температуры плавления малых наночастиц перестают зависеть от их размера, то есть энергии связи атомов оказывается практически одинаковыми, несмотря на различное число координационных сфер в кластерах разного диаметра. При этом использование квантово-механических методов для расчета характеристик относительно больших систем (несколько тысяч атомов) пока не представляется технически возможным.

Используемый нами метод основан на том, что большая группа свойств переходных металлов может быть полностью определена из плотности состояний внешних d -электронов. Вторым моментом плотности состояния есть μ_2 . Экспериментально установлено, что энергия когезии металлов пропорциональна ширине плотности состояний, которая в приближении вторых моментов есть просто $\sqrt{\mu_2}$. Учитывая только $dd\sigma$ -, $dd\pi$ - и $dd\delta$ -орбитали, зонную энергию атома i можно представить, как:

$$E_B^i = - \left(\sum_j \xi_{\alpha\beta}^2 e^{-2q_{\alpha\beta}(r_{ij}/r_0^{\alpha\beta}-1)} \right)^{1/2}. \quad (1)$$

Энергия E_B^i зависит только от расстояния между атомами i и j (r_{ij}) и формально является тем же самым, что и функция погружения в методе погруженного атома. Модель также имеет слагаемое, отвечающее за отталкивающее взаимодействие, в виде суммы борн-майеровских парных ионных потенциалов:

$$E_R^i = \sum_j A_{\alpha\beta} e^{-P_{\alpha\beta}(r_{ij}/r_0^{\alpha\beta}-1)}, \quad (2)$$

где α и β – различные типы атомов.

Полная энергия системы имеет вид:

$$E_c = \sum_i (E_R^i + E_B^i). \quad)$$

Значения величин $\zeta_{\alpha\beta}$, $p_{\alpha\beta}$, $A_{\alpha\beta}$, $q_{\alpha\beta}$ и $r_0^{\alpha\beta}$, а также радиус обрезания потенциала r_c , определяют параметры элементов системы. Величины $\zeta_{\alpha\beta}$, $p_{\alpha\beta}$, $A_{\alpha\beta}$ и $q_{\alpha\beta}$ находятся подгонкой к экспериментальным значениям энергии когезии, параметру решетки, объемному модулю B и упругим постоянным C_{44} и C' . Именно такой метод, в котором ион-ионное взаимодействие описано с учетом зонного характера связи и короткодействующего парного потенциала отталкивания, на наш взгляд, способен достаточно адекватно описать некоторые характерные особенности металлических бинарных систем.

На основе данной модели нами исследовалось влияние ряда начальных условий на первичную стадию синтеза бинарных наночастиц Cu-Au методом конденсации, анализировалось внутреннее строение получаемых нанокластеров. Более подробно о методике проведенного моделирования изложено в [4, 5].

3. Результаты и обсуждение

Хорошая смешиваемость меди и золота доказана многолетними экспериментальными исследованиями: при достаточно больших значениях термической энергии в макроскопических образцах атомы золота и меди могут перемешиваться в любом соотношении. Это позволяет получать бинарные макроскопические композиции Cu-Au любого целевого состава. При низких значениях термической энергии сплавы Cu-Au формируют либо тетрагональную сверхструктуру $L1_0$ для стехиометрического состава CuAu, либо кубическую сверхструктуру $L1_2$ для стехиометрии $CuAu_3$ и Cu_3Au . Таким образом, в макроскопическом масштабе фазовая диаграмма внутреннего строения в материаловедении полностью известна. Но с переходом на наноуровень в ней возникают пробелы. Это значительно ограничивает создание необходимого внутреннего и внешнего строения наночастиц Cu-Au столь востребованного в различных областях как современной промышленности, так и будущих технологий.

В последнее время было испытано несколько методов синтеза

наносистем Cu-Au для создания наночастиц различной формы и состава. Химическими методами удалось синтезировать наночастицы Cu-Au различных форм: сферической, пентагональной, стержнеобразной, кубической и других. Например, в работе [6] совместным восстановлением солей золота и меди были получены бинарные наночастицы Cu-Au достаточно больших размеров (45–200 нм) с пятичастичной структурой. А в [7] предлагаются электрохимические способы синтеза декаэдрических и икосаэдрических частиц наносплава Cu-Au и т.д. Также при производстве наночастиц Cu-Au применяются и другие подходы, основанные на физических принципах, которые теоретически дают лучший контроль состава при изготовлении биметаллических наночастиц: ионная имплантация, термическое испарение в условиях сверхвысокого вакуума [8], метод лазерного осаждения и т.д. Благодаря им, удалось получить наночастицы Cu-Au намного меньшего размера (1.0–4.5 нм) с декаэдрическим или октоэдрическим строением при испарении лазером макроскопических образцов CuAu, Cu₃Au и CuAu₃ [9].

Однако в проведенных экспериментах только фиксировалось различная морфология Cu-Au наночастиц без четкого понимания того, какая именно структура может сформироваться в результате того или иного метода синтеза. Поэтому в представленной работе мы попробуем определить методом компьютерного моделирования возможную связь различного процентного содержания атомов золота в исходной газовой фазе и формирующимся при этом внутренним строением синтезированных наночастиц Cu-Au.

Для анализа возьмем два стехиометрических состава Cu₃Au и CuAu с повышающимся процентным содержанием золота. В качестве базы будем использовать результаты по конденсации из газовой среды атомов чистой меди, проведенного нами при аналогичных условиях моделирования. В данном случае были получены следующие соотношения между возможными типами атомного построения Cu наночастиц: около 26% кластеров обладали классической для макроскопического случая ГЦК структурой, у 20% внутреннее строение характеризовалось пятичастотной икосаэдрической (Ih) симметрией, а 54%

имело декаэдрическую (Dh) конфигурацию. При добавлении в исходный атомный пар золота (в объеме 25%) наблюдалось резкое, практически до нуля, сокращение процента кластеров с ГЦК структурой и рост (до 80%) декаэдрической фазы. Процент наночастиц с икосаэдрическим строением оставался почти неизменным. На рисунке 1 представлены примеры конфигураций бинарных наночастиц.

Для второй стехиометрической конфигурации (целевой состав CuAu) увеличение содержания золота в исходной газовой смеси до 50% приводило к кардинальным изменениям строения получаемых при моделировании наночастиц. Имел место незначительный рост (до 3,5%) числа кластеров с ГЦК построением атомов и увеличение (почти в два раза до 38,4%) доли кластеров с икосаэдрическим строением в образующейся из расплава кристаллической структуре. Также наблюдалось взрывное (до 24%) увеличение числа кластеров с аморфной фазой, в основном за счет уменьшения (до 34%) процента кластеров, обладающих декаэдрической модификацией.

Таким образом, по результатам проведенного компьютерного моделирования процессов конденсации из газовой среды бинарной газовой смеси Cu-Au с разным целевым составом в сравнении с данными аналогичного моделирования для случая чистой меди можно сделать вывод, что влияние процентного содержания золота на структуре получаемых наночастиц носит достаточно сложный характер. При относительно небольшой добавке (25%) происходит полное исчезновение кластеров с ГЦК строением с формированием наночастиц практически только с пятичастичной симметрией (с преобладанием Dh конфигурации). При одинаковой скорости испарения прекурсоров рост процентного содержания в газовой смеси атомов золота приводит, к тому, что кластеры CuAu часто оказываются неспособными сформировать явно различимую кристаллическую форму, из-за чего примерно каждый четвертый кластер приобретает аморфное состояние. Полученный результат может быть объяснен только на основе анализа кинетических процессов, приводящих к выдавливанию атомов золота к поверхности бинарной наночастицы, что

наблюдалась нами в более ранних работах.

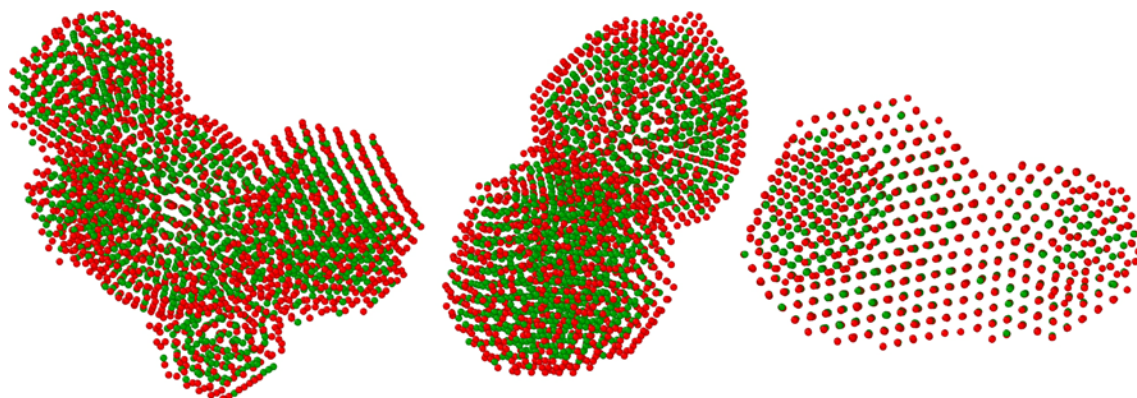


Рис. 1. Бинарные наночастицы Cu-Au целевого состава Cu_3Au . Зеленным цветом показаны атомы меди, красным – атомы золота.

4. Заключение

Ключевым аспектом любой методики синтеза наночастиц является определение температурно-зависимых факторов, влияющих на процессы их формирования и роста. После этапа первичного образования кластеров решающую роль как в диффузионно-индуцированной перестройке атомного строения, так и процессах объединения первичных кластерных фрагментов друг с другом играет скорость охлаждения. Кроме этого, становится понятно, что на данный процесс влияют и другие факторы, например, максимальная температура системы, концентрация прекурсоров, химическая композиция буферного газа и т.д. В этом контексте синтез из газовой фазы является одним из основных физических методов получения нанопорошков имеющим ряд четко регулируемых начальных параметров, позволяющих определять целый набор конечных физико-химических свойств, синтезируемых наночастиц.

В представленной работе методом компьютерного моделирования был проведен анализ внутреннего строения бинарных наночастиц Cu-Au разного целевого состава. Частицы были сформированы при имитации синтеза из высокотемпературной газовой фазы, получаемой методом испарения первичных веществ пучком электронов высоких энергий. Данные численного анализа показали зависимость между структурным типом формируемых частиц и

концентрацией атомов золота. Было показано, что рост доли золота может привести как к полному образованию кластеров только с пятичастичной симметрией, так и к существенному проценту аморфных наночастиц при еще большем увеличении концентрации атомов Au в первичной газовой среде.

Список литературы

1. Schulz, C. Gas-phase synthesis of functional nanomaterials: Challenges to kinetics, diagnostics, and process development / C. Schulz, T. Dreier, M. Fikri, H. Wiggers // *Proceedings of the Combustion Institute*. – 2019. – V. 37. – I. 1. – P. 83-108. DOI: 10.1016/j.proci.2018.06.231
2. Cleri, F. Tight binding potentials for transition metals and alloys / F. Cleri, V. Rosato // *Physical Review B*. – 1993. – V. 48. – I. 1. – P. 22-33. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.22
3. Samsonov, V.M. Melting temperature and binding energy of metal nanoparticles: size dependences, interrelation between them, and some correlations with structural stability of nanoclusters / V.M. Samsonov, S.A. Vasilyev, K.K. Nebyvalova, I.V. Talyzin, N.Y., Sdobnyakov, et al. // *Journal of Nanoparticle Research*. – 2020. – V. 22(8). – Art. № 247. – 15 p. DOI:10.1007/s11051-020-04923-6
4. Гафнер, Ю.Я. Некоторые новые результаты моделирования процессов газофазного синтеза наночастиц Cu-Au / Ю.Я. Гафнер, С.Л. Гафнер, Ю.А. Куликова // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2020. – В. 12. – С. 384-393. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.384
5. Gafner, Yu.Ya The role of gold atom concentration in the processes of formation of Cu-Au nanoparticles from the gas phase / Yu.Ya. Gafner, S.L. Gafner, D.A. Ryzkova, A.V. Nomoev // *Beilstein Journal of Nanotechnology*. – 2021. – V. 12. – P.72-81. DOI:10.3762/bxiv.2020.88.v1
6. He, R. Facile synthesis of pentacle gold-copper alloy nanocrystals and their plasmonic and catalytic properties / R. He, Y.-C. Wang, X. Wang, Z. Wang, G. Liu, et al. // *Nature Communications*. – 2014. – V. 5. – Art. №4327. – 23 p. DOI: 10.1038/ncomms5327

7. Prunier, H. New insights into the mixing of gold and copper in a nanoparticle from a structural study of Au–Cu nanoalloys synthesized via a wet chemistry method and pulsed laser deposition / H. Prunier, J. Nelayah, Ch. Ricolleau, G. Wang, S. Nowak, et.al. // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2015. – V. 17. – P. 28339-28346. DOI: 10.1039/c5cp01491c
8. Wilson, A. Epitaxial growth of bimetallic Au-Cu nanoparticles on TiO₂(110) followed in situ by scanning tunneling microscopy and grazing-incidence x-ray diffraction / A. Wilson, R. Bernard, A. Vlad, Y. Borensztein, A. Coati, et.al. // *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*. – 2014. – V. 90. – Art. № 075416. DOI:10.1103/PHYSREVB.90.075416
9. Tran, D.T. Truncated-octahedral copper-gold nanoparticles / D.T. Tran, I.P. Jones, R.L. Johnston, J.A Preece and C.R. van den Brom // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2010. – V. 241. – Art. № 012086. DOI:10.1088/1742-6596/241/1/012086

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ МЕХАНИЗМА УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ДЕГАЗАЦИИ ЖИДКОСТИ ЗА СЧЁТ СБЛИЖЕНИЯ ПУЗЫРЬКОВ

Р.Н. Голых, С.Н. Цыганок, В.Н. Хмелёв, А.Р. Барсуков, В.А. Шакура

Бийский технологический институт (филиал) Алтайского государственного
технического университета им. И.И. Ползунова, *romangl90@gmail.com*

В жидкости, на которую воздействуют относительно интенсивные акустические колебания, уменьшается количество газа, как растворённого, так находящегося в виде пузырьков. Этот эффект находит применение в промышленной практике при дегазации расплавов металла и стекла, растворов смол, вискозы и масел, различного рода напитков и проч. Кроме того, ультразвуковая дегазация является одной из причин ускорения электрохимических процессов в звуковом поле.

В настоящее время практически отсутствует ясная физическая картина механизма дегазации и чёткое представление об основных качественных и количественных зависимостях этого процесса от параметров звукового поля. Однако не зная самого механизма дегазации, невозможно использовать этот метод эффективно, и в большинстве случаев работа проводится в случайных, неоптимальных условиях, что отрицательно сказывается на производительности действующих установок и ограничивает более широкое внедрение данного способа дегазации.

В процессе дегазации можно выделить три стадии:

1) Небольшие воздушные пузырьки, существующие в жидкости, растут за счёт диффузии в них растворённого газа. Если в обычных условиях этот процесс происходит весьма медленно, то в звуковом поле вследствие колебаний пузырьков возникает специфический акустический эффект, ускоряющий массопередачу.

2) Пары или группы мелких пузырьков коалесцируют, образуя пузырьки больших размеров. Эта фаза обусловлена действием акустических потоков, радиационного давления, сил Бьеркнесса и Бернулли.

3) Выросшие пузырьки, обладая большей плавучестью, быстрее поднимаются к поверхности и покидают жидкость,

Процесс дегазации вызывается различными факторами, поэтому так затруднено его исследование. В эксперименте не удаётся выделить и оценить степень влияния каждого из этих факторов, можно только контролировать общее изменение содержания газа в жидкости и по нему судить о суммарном воздействии.

Поэтому далее описана предложенная модель ультразвуковой дегазации жидкости.

При сближении кавитационных пузырьков предполагается, что между ними действует сила Бьеркнеса [1]. С учётом силы Бьеркнеса движение ансамбля пузырьков описывается следующим уравнением:

$$\left(1 - \frac{\dot{R}_i}{c}\right) R_i \ddot{R}_i + \frac{3}{2} \dot{R}_i^2 \left(1 - \frac{\dot{R}_i}{3c}\right) = \left(1 + \frac{\dot{R}_i}{c}\right) \frac{p_{wi} - p(\mathbf{r}_i, t)}{\rho_L} + \frac{R_i}{\rho_L c} \frac{\partial}{\partial t} (p_{wi} - p) -$$

$$- \sum_{j=1 \dots n, j \neq i} \frac{2R_j \dot{R}_j + R_j^2 \ddot{R}_j}{d_{ij}^2};$$

$$p_{wi} = \left(P_0 + \frac{2\sigma}{R_{0i}}\right) \left(\frac{R_{0i}}{R_i}\right)^{3\gamma} - \frac{2\sigma}{R_i} - \frac{4\eta \dot{R}_i}{R_i};$$

где $p(\mathbf{r}_i, t)$ – давление, обусловленное акустическим воздействием в точке $\mathbf{r}_i$; γ – показатель адиабаты газовой фазы внутри пузырька; R_i – радиус i -го кавитационного пузырька; R_{0i} – начальный радиус i -го кавитационного пузырька; c – скорость звука в жидкости; σ – поверхностное натяжение жидкости; η – динамическая вязкость жидкости; $\mathbf{r}_i$ – радиус-вектор центра i -го кавитационного пузырька; d_{ij} – расстояние между центрами i -го и j -го кавитационного пузырька.

Для координат центров кавитационных пузырьков выполняется кинетическое уравнение с учётом сил, обусловленных обтеканием со стороны жидкости и сил Бьеркнеса со стороны соседних пузырьков:

$$\frac{4\pi R_{0i}^3}{3} \rho_G \frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2} = \sum_{j=1, n, j \neq i} \frac{4\pi R_i^3}{3 d_{ij}^3} \rho_L \frac{\partial \left(R_j^2 \dot{R}_j \right)}{\partial t} \mathbf{d}_{ij} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{4\pi R_i^3}{3} \rho_L \left(-\frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial t} \right) \right) + 4\pi \eta R_i \left(-\frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial t} \right)$$

Для решения получившейся системы уравнений необходимо сделать следующие преобразования.

Вторые производные радиусов кавитационных пузырьков выражаются через радиусы вплоть до их первых производных следующим образом.

$$C_i = R_i \ddot{R}_i;$$

$$\left(1 - \frac{\dot{R}_i}{c} \right) C_i + \frac{3}{2} \dot{R}_i^2 \left(1 - \frac{\dot{R}_i}{3c} \right) = \left(1 + \frac{\dot{R}_i}{c} \right) \frac{p_{wi} - p(\mathbf{r}_i, t)}{\rho_L} + \frac{R_i}{\rho_L c} \frac{\partial}{\partial t} (p_{wi} - p) -;$$

$$- \sum_{j=1, \dots, n, j \neq i} \frac{2 R_j \dot{R}_j^2 + R_j C_j}{d_{ij}^2}$$

Данное выражение представляет собой систему линейных уравнений вида

$$\mathbf{A} \mathbf{C} = \mathbf{b}; \text{ где } \mathbf{A} = \{a_{ij}\}; a_{ij} = \delta_{ij} \left(1 - \frac{\dot{R}_i}{c} \right) + (1 - \delta_{ij}) \frac{R_j}{d_{ij}}; \mathbf{b} = \{b_i\};$$

$$b_i = \left(1 + \frac{\dot{R}_i}{c} \right) \frac{p_{wi} - p(\mathbf{r}_i, t)}{\rho_L} + \frac{R_i}{\rho_L c} \frac{\partial}{\partial t} (p_{wi} - p) - \sum_{j=1, \dots, n, j \neq i} \frac{2 R_j \dot{R}_j^2}{d_{ij}^2} -$$

$$- \frac{3}{2} \dot{R}_i^2 \left(1 - \frac{\dot{R}_i}{3c} \right)$$

При определённом условии для радиусов кавитационных пузырьков и скоростей движения стенок пузырька:

$$\frac{\max_{i, j=1, \dots, n, i \neq j} \left| \frac{R_j}{d_{ij}} \right|}{\min_{i=1, \dots, n} \left| 1 - \frac{\dot{R}_i}{c} \right|} \leq \frac{1}{n}; \quad \min_{i=1, \dots, n} \left| 1 - \frac{\dot{R}_i}{c} \right| \neq 0;$$

Т. е. при достаточно малых скоростях движения стенок пузырьков [2] по сравнению со скоростью звука и при достаточно больших расстояниях между их центрами по сравнению с их радиусам система уравнений относительно $C_i = R_i \ddot{R}_i$ имеет единственное решение.

По индукции доказано, что определитель матрицы **A** не равен нулю, а как следствие, система уравнений имеет единственный корень, поскольку

$$\frac{\max_{i,j=1\dots n, i \neq j} |a_{ij}|}{\min_{i=1\dots n} |a_{ii}|} \leq \frac{1}{n}; \quad \min_{i=1\dots n} |a_{ii}| \neq 0.$$

Доказательство проводится по индукции. При $n = 1$ неравенства выполняются:

$$\frac{\max_{i,j=1\dots 1, i \neq j} |a_{ij}|}{\min_{i=1\dots 1} |a_{ii}|} = 1.$$

Если для $n-1$ утверждение верно, то далее проведена проверка утверждения для n .

В начале нужно провести преобразование матрицы **A** следующим образом.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n-1} & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n-1} & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ a_{(n-1)1} & a_{(n-1)2} & \dots & a_{n-1n-1} & a_{n-1n} \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn-1} & a_{nn} \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \dots & \frac{a_{1n-1}}{a_{11}} & \frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ \frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & \dots & \frac{a_{2n-1}}{a_{11}} & \frac{a_{2n}}{a_{11}} \\ \frac{a_{22}}{a_{11}} & \vdots & \dots & \frac{a_{22}}{a_{11}} & \frac{a_{22}}{a_{11}} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ \frac{a_{(n-1)1}}{a_{11}} & \frac{a_{(n-1)2}}{a_{11}} & \dots & 1 & \frac{a_{n-1n}}{a_{11}} \\ \frac{a_{(n-1)(n-1)}}{a_{11}} & \frac{a_{(n-1)(n-1)}}{a_{11}} & \dots & \frac{a_{(n-1)(n-1)}}{a_{11}} & \frac{a_{(n-1)(n-1)}}{a_{11}} \\ \frac{a_{n1}}{a_{11}} & \frac{a_{n2}}{a_{11}} & \dots & \frac{a_{nn-1}}{a_{11}} & 1 \\ \frac{a_{nn}}{a_{11}} & \frac{a_{nn}}{a_{11}} & \dots & \frac{a_{nn}}{a_{11}} & \frac{a_{nn}}{a_{11}} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{B} = \{b_{ij}\}$$

$$b_{ij} = \frac{a_{ij}}{a_{ii}}; |b_{ij}| = \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \leq \frac{\max_{i,j=1\dots n, i \neq j} |a_{ij}|}{\min_{i=1\dots n} |a_{ii}|} \leq \frac{1}{n}; \text{ если } i \neq j.$$

Далее матрицу В можно преобразовать следующим образом. Первая строка матрицы В остаётся без изменений $d_{1j} = b_{1j}$. При $i \geq 2$

$$d_{ij} = b_{ij} - b_{1j}b_{i1}. \text{ Очевидно, что } d_{i1} = b_{i1} - b_{i1}b_{11} = 0. \text{ Определим тогда}$$

матрицу Е размером $(n-1) \times (n-1)$ следующим образом:

$$E = \{e_{ij}\}$$

$$e_{ij} = d_{i+1,j+1}$$

Очевидно, что определитель матрицы d равен определителю матрицы Е.

Для матрицы Е:

$$\begin{aligned} \frac{\max_{i,j=1\dots n-1, i \neq j} |e_{ij}|}{\min_{i=1\dots n-1} |e_{ii}|} &\leq \frac{\max_{i,j=2\dots n, i \neq j} |d_{ij}|}{\min_{i=2\dots n} |d_{ii}|} = \frac{\max_{i,j=2\dots n, i \neq j} |b_{ij} - b_{1j}b_{i1}|}{\min_{i=2\dots n} |b_{ii} - b_{i1}b_{11}|} \leq \\ &\leq \frac{\max_{i,j=2\dots n, i \neq j} (|b_{ij}| + |b_{1j}b_{i1}|)}{\min_{i=2\dots n} |b_{ii} - b_{i1}b_{11}|} \leq \frac{\frac{1}{n} + \frac{1}{n^2}}{\min_{i=2\dots n} |b_{ii} - b_{i1}b_{11}|} \leq \frac{\frac{1}{n} + \frac{1}{n^2}}{1 - \frac{1}{n^2}} \leq \frac{\frac{1}{n}}{\left(1 - \frac{1}{n}\right)} = \\ &= \frac{1}{n-1} \end{aligned}$$

В силу индукционного предположения определитель матрицы Е не равен нулю, поэтому очевидно, что определитель матрицы А также не равен нулю. Следовательно, система уравнений относительно С имеет единственное решение.

Это означает, что можно однозначно выразить вторые производные радиусов кавитационных пузырьков через 1-е и 0-е производные радиусов.

Данная система решается путём численного интегрирования методом Рунге-Кутты.

На следующем рисунке 1 приведена зависимость расстояния между кавитационными пузырьками от времени в однородном акустическом поле.

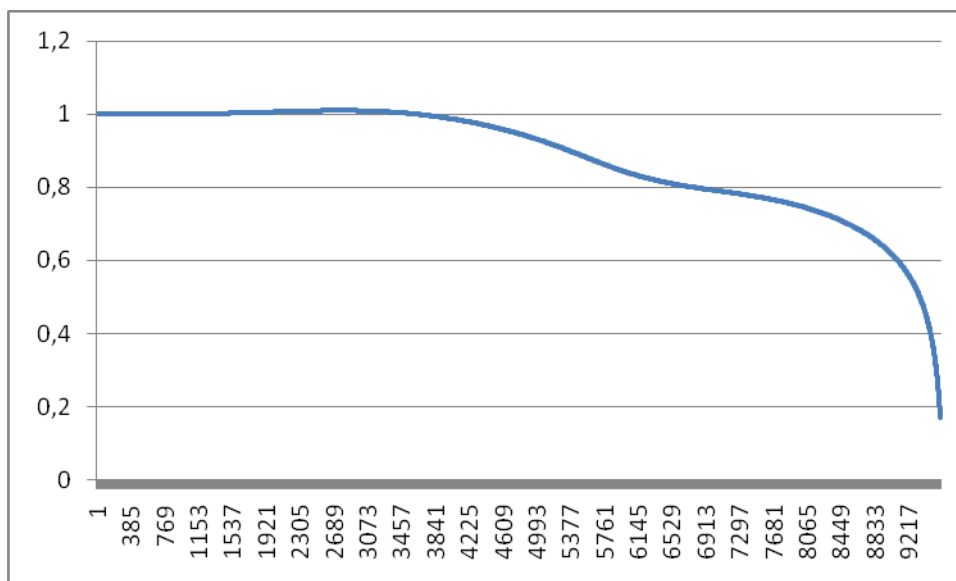


Рис. 1. Зависимость относительного расстояния между кавитационными пузырьками от времени (в мкс) в однородном акустическом поле.

Представленная зависимость подтверждает известный результат о сближении кавитационных пузырьков при синфазном колебании их стенок, что может объяснять процесс дегазации жидкостей, как сближение пузырьков небольших размеров в более крупные и их дальнейшее всплывание.

Далее приведены зависимости радиусов кавитационных пузырьков (рисунок 2) от времени при различных расстояниях между ними по сравнению с начальными радиусами R_0 .

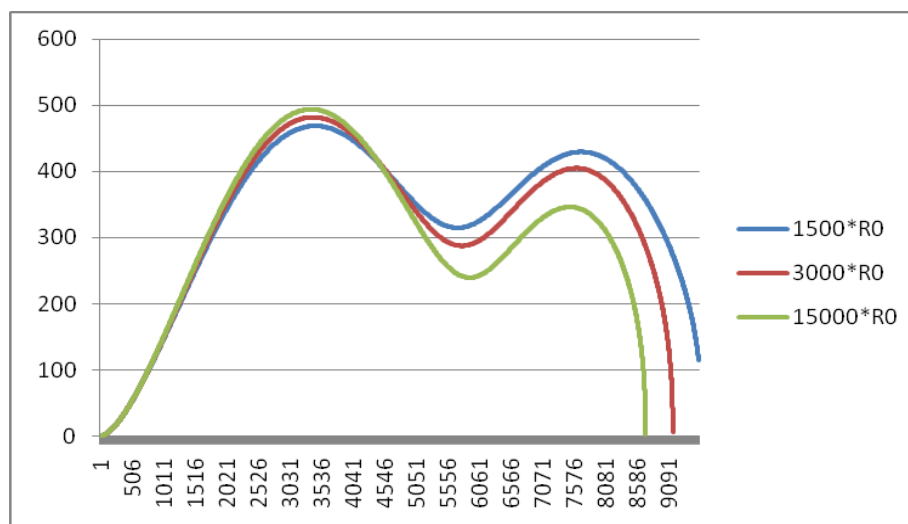


Рис. 2. Зависимости радиусов кавитационных пузырьков (мкм) от времени (мкс) при различном начальном расстоянии между ними.

Представленные зависимости позволяют сделать об увеличении времени схлопывания кавитационных полостей при уменьшении начального расстояния между ними. Например, при начальном расстоянии $1500R_0$ успевает произойти непосредственный контакт до их схлопывания.

Таким образом, теоретически обоснован механизм дегазации жидкости за счёт сближения кавитационных пузырьков.

Список литературы

1. Brennen, C.E. Cavitation and bubble dynamics [Текст] / C.E. Brennen. – New York: Oxford University Press, 1995. – 294.
2. Minnaert, M. On musical air-bubbles and the sounds of running water [Текст] / M. Minnaert // Philos. Mag., 1933. – Vol. 16, Iss. 17. – P. 235.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРУШЕНИЯ МОНОМЕРНЫХ ЦЕПЕЙ В РЕЗУЛЬТАТЕ СОУДАРЕНИЯ, ИНИЦИИРОВАННОГО УЛЬТРАЗВУКОВОЙ КАВИТАЦИЕЙ⁵

Р.Н. Голых¹, В.Н. Хмелёв¹, А.В. Шалунов¹, А.Р. Барсуков¹, В.А. Шакура¹,
И.А. Маняхин¹, Д.А. Ильченко¹

¹Бийский технологический институт (филиал) Алтайского государственного
технического университета им. И.И. Ползунова, *romangl90@gmail.com*

Исследование механизма разрушения макромолекул под действием ультразвуковой кавитации представляет собой важную задачу.

Ультразвуковое кавитационное разрушение макромолекул полимеров доказано экспериментальными данными, и наличие разрушения подтверждено ИК- и ЯМР-спектроскопией [1–3].

На сегодняшний день известен механизм разрушения макромолекул (разрыва Н-Н связей), основанный на том, что в условиях ультразвуковой кавитации создаются микроскопические зоны экстремально высоких давлений, в которых повышается вероятность актов разрыва макромолекулы. Разрыв происходит тогда и только тогда, когда относительная скорость при соударении макромолекул между собой превышает критическое значение. За счёт кавитации доля макромолекул, относительная скорость которых превышает критическое значение, увеличивается.

Для построения модели, позволяющей адекватно предсказать кинетику данного процесса под действием ультразвука, необходимо сперва провести численное исследование образования фрагментов при соударении пары макромолекул.

Для моделирования динамики взаимодействующих мономерных звеньев рассматривались макромолекулы жидких полимеров, поскольку в твёрдых полимерах невозможно создать кавитацию.

Макромолекулы жидких полимеров представляют собой цепи, близкие к

⁵ Исследование выполнено при финансовой поддержке Гранта Президента РФ № МК-5387.2021.1.1.

линейным, поскольку число мономерных звеньев не превышает 50...100.

Оценки, проведённые на основании уравнений динамики кавитационного пузырька, позволили выявить характерную (среднюю квадратичную) скорость относительного движения макромолекул в локальной зоне вблизи стенок пузырька в момент схлопывания:

$$\begin{aligned}
 |\mathbf{u} - \mathbf{v}|^2 &= u^2 + v^2 - \\
 &- 2uv \left(\begin{pmatrix} \sin \theta_u \cos \varphi_u \\ \sin \theta_u \sin \varphi_u \\ \cos \theta_u \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sin \theta_v \cos \varphi_v \\ \sin \theta_v \sin \varphi_v \\ \cos \theta_v \end{pmatrix} \right) = u^2 + v^2 - ; \\
 &- 2uv(\sin \theta_u \sin \theta_v \cos(\varphi_u - \varphi_v) + \cos \theta_u \cos \theta_v) \\
 \sqrt{\iiint \iiint |\mathbf{u} - \mathbf{v}|^2 f(v_x) f(v_y) f(v_z) f(u_x) f(u_y) f(u_z) du_x du_y du_z dv_x dv_y dv_z} &= \\
 = \frac{2\pi}{\left(\int e^{\frac{\rho w^2}{2p}} dw \right)^3} \sqrt{\iint e^{\frac{\rho(u^2+v^2)}{2p}} u^2 v^2 \times \iint \left((u^2 + v^2) \sin \theta_u \sin \theta_v - \frac{uv \sin(2\theta_u) \sin(2\theta_v)}{2} \right) \times d\theta_u d\theta_v dudv} &= \\
 = \frac{1}{\left(\int e^{\frac{\rho w^2}{2p}} dw \right)^3} \sqrt{\frac{12\pi^3}{\left(\frac{\rho}{2p} \right)^4}} = 2 \sqrt{\frac{6p}{\rho}} \sim 7745 \frac{м}{с} &
 \end{aligned}$$

где $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$ – вектора скорости движения каждой из взаимодействующих макромолекул из пары, м/с; f – плотность распределения компоненты скорости центра масс макромолекулы, нормированная на 1, с/м; ρ – плотность жидкости, кг/м³; p – давление в жидкости вблизи стенок пузырька в момент схлопывания, Па.

Далее проведены численные исследования поведения макромолекул, представляющих собой линейные цепи мономеров, при парном соударении.

При построении модели предполагалось, что потенциал взаимодействия между мономерными звеньями может быть приближённо описан функцией Морзе [4]:

$$V(r) = D_\sigma \left(\left(1 - e^{-a(r-r_e)} \right)^2 - 1 \right);$$

где V – величина потенциальной энергии взаимодействия мономерных звеньев, находящихся на расстоянии r (м) друг от друга, Дж; D_σ – модуль энергии взаимодействия между парой мономерных звеньев мономерными звеньями, Дж;

r_e – равновесное расстояние между мономерными звеньями, м; α – постоянная экспоненциальной убыли энергии взаимодействия с увеличением расстояния, м⁻¹.

Математическая постановка задачи выглядит следующим образом:

$$m_0 \frac{\partial^2 x_{qi,p}}{\partial t^2} = - \sum_{q_i=1}^4 \sum_{j=1, (i,q) \neq (j,q_i)}^N \frac{x_{qi,p} - x_{q_i j,p}}{\sqrt{\sum_{p_1=1}^3 (x_{qi,p_1} - x_{q_i j,p_1})^2}} \frac{dV}{dr} \left(\sqrt{\sum_{p_1=1}^3 (x_{qi,p_1} - x_{q_i j,p_1})^2} \right);$$

$$x_{1i,1}(0) = \left(ir_e + \frac{r_e}{2} \right) \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right); x_{1i,2}(0) = \left(ir_e + \frac{r_e}{2} \right) \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right); x_{1i,3}(0) = \frac{d_0}{2};$$

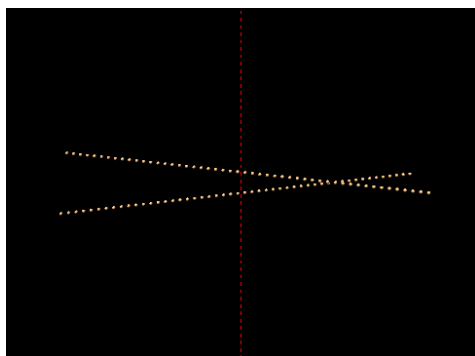
$$x_{2i,1}(0) = -x_{1i,1}(0); x_{2i,2}(0) = -x_{1i,2}(0); x_{2i,3}(0) = x_{1i,3}(0);$$

$$x_{3i,1}(0) = x_{1i,1}(0); x_{3i,2}(0) = -x_{1i,2}(0); x_{3i,3}(0) = -x_{1i,3}(0);$$

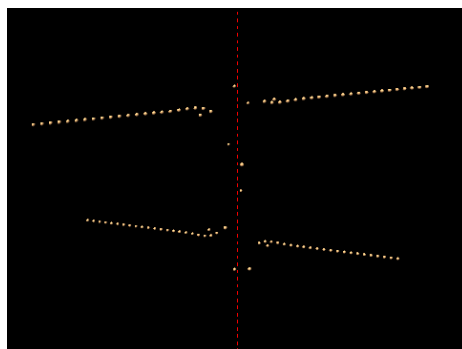
$$x_{4i,1}(0) = -x_{1i,1}(0); x_{4i,2}(0) = x_{1i,2}(0); x_{4i,3}(0) = -x_{1i,3}(0);$$

где m_0 – масса отдельного мономерного звена, кг; $2N$ – количество мономерных звеньев в макромолекуле; $x_{qi,p}$ – координата по оси p мономерного звена с номером $i + N \begin{cases} 1, \text{ if } (q=1) \text{ or } (q=3) \\ 0, \text{ if } (q=2) \text{ or } (q=4) \end{cases}$ в макромолекуле $\begin{cases} 1, \text{ if } (q=1) \text{ or } (q=2) \\ 2, \text{ if } (q=3) \text{ or } (q=4) \end{cases}$; r_e – равновесное расстояние между мономерными звеньями, м; φ – начальный угол между линейными цепями макромолекул (угол взаимной ориентации); d_0 – начальное расстояние между линейными цепями макромолекул, м.

Результаты численного моделирования взаимодействия макромолекул представлены на рис. 1–10 (параметры макромолекул удовлетворяют соотношению $\sqrt{\frac{\alpha D_\sigma r_e}{m_0}} = 2300 \frac{\text{м}}{\text{с}}$). Первоначально было исследовано влияние угла ориентации между макромолекулами на процесс разрушения, конфигурации макромолекул до и после разрушения в результате столкновения представлены на рис. 1–4. Начальная скорость относительного движения центров масс макромолекул при исследовании влияния угла взаимной ориентации составляла 23 000 м/с.

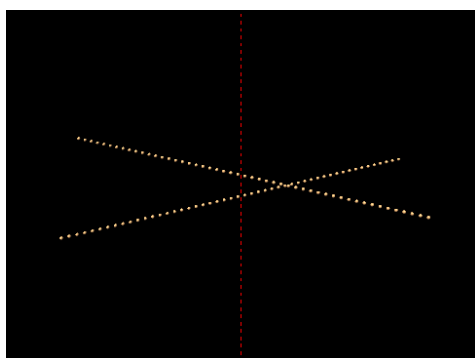


а) начальная конфигурация
макромолекул

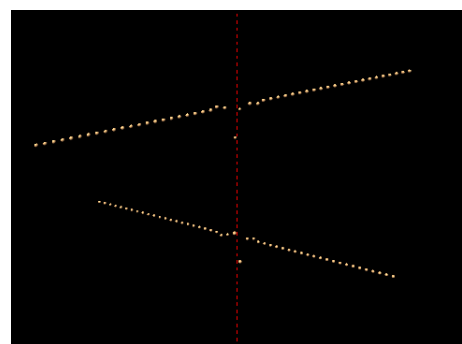


б) конфигурация макромолекул после
соударения

Рис. 1. Конфигурация макромолекул до и после соударения при начальном угле взаимной ориентации 18 градусов (начальная скорость относительного движения центров масс 23 000 м/с)

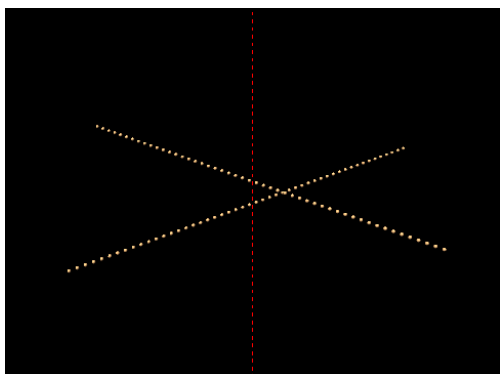


а) начальная конфигурация
макромолекул

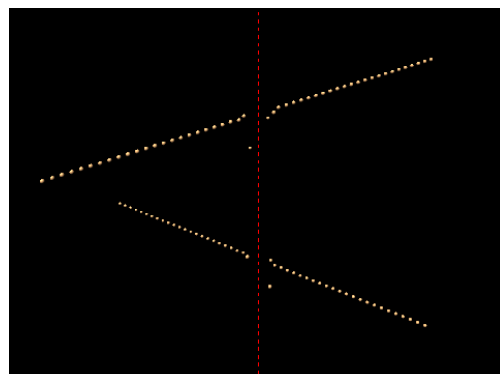


б) конфигурация макромолекул после
соударения

Рис. 2. Конфигурация макромолекул до и после соударения при начальном угле взаимной ориентации 36 градусов (начальная скорость относительного движения центров масс 23 000 м/с)

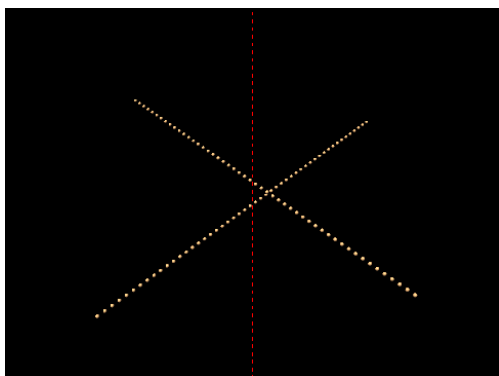


а) начальная конфигурация
макромолекул

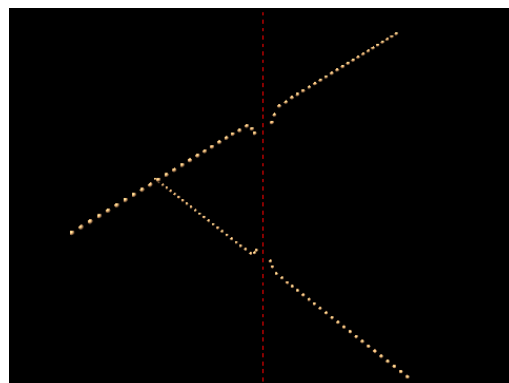


б) конфигурация макромолекул после
соударения

Рис. 3. Конфигурация макромолекул до и после соударения при начальном угле взаимной ориентации 54 градусов (начальная скорость относительного движения центров масс 23 000 м/с)



а) начальная конфигурация
макромолекул



б) конфигурация макромолекул
после соударения

Рис. 4. Конфигурация макромолекул до и после соударения при начальном угле взаимной ориентации 90 градусов (начальная скорость относительного движения центров масс 23 000 м/с)

Как следует из представленных конфигураций, при начальной скорости 23000 м/с (в 2,96 раз превышает среднюю квадратичную) каждая макромолекула распадается на 2 фрагмента с большим количеством мономерных звеньев $\geq 0,95 \frac{N}{2}$ и некоторое количество фрагментов, каждый из которых содержит ровно 1 мономерное звено. При начальном угле взаимной ориентации 90 градусов каждая макромолекула распадается ровно на 2 фрагмента.

Далее проведены исследования влияния начальной скорости

относительного движения макромолекул на конфигурацию. Результаты моделирования представлены на рис. 5–10.

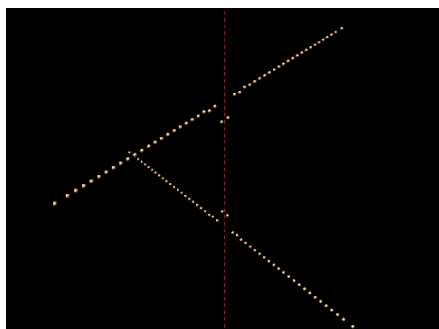


Рис. 5. Конфигурация макромолекул после соударения при начальной скорости относительного движения центров масс 20 700 м/с и угле взаимной ориентации 90 градусов

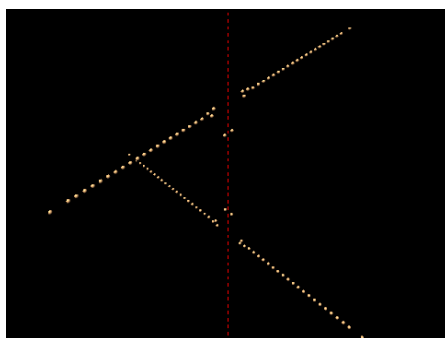


Рис. 6. Конфигурация макромолекул после соударения при начальной скорости относительного движения центров масс 18 400 м/с и угле взаимной ориентации 90 градусов

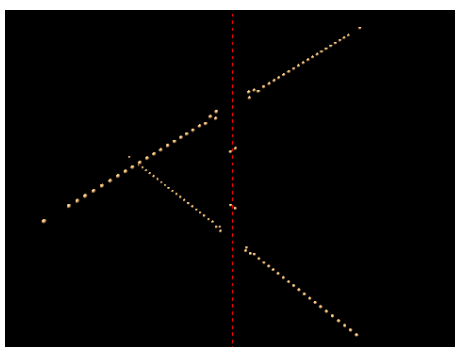


Рис. 7. Конфигурация макромолекул после соударения при начальной скорости относительного движения центров масс 16 100 м/с и угле взаимной ориентации 90 градусов

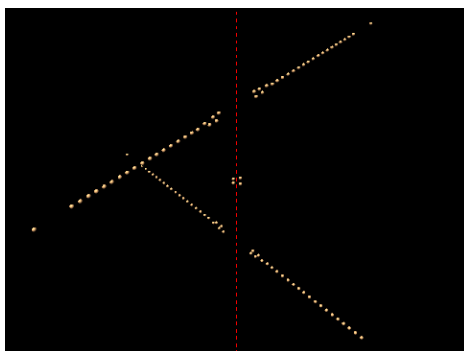


Рис. 8. Конфигурация макромолекул после соударения при начальной скорости относительного движения центров масс 11 500 м/с и угле взаимной ориентации 90 градусов

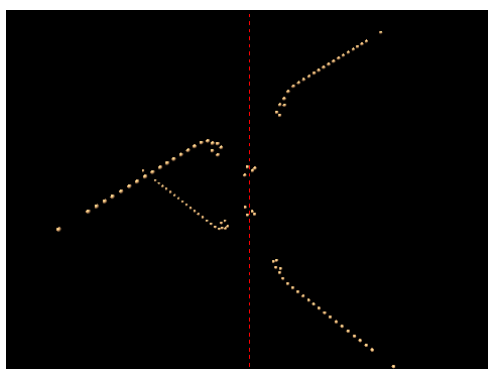


Рис. 9. Конфигурация макромолекул после соударения при начальной скорости относительного движения центров масс 6 900 м/с и угле взаимной ориентации 90 градусов

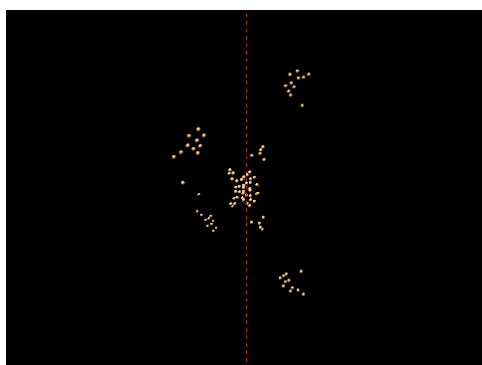


Рис. 10. Конфигурация макромолекул после соударения при начальной скорости относительного движения центров масс 2 300 м/с и угле взаимной ориентации 90 градусов

Как следует из представленных рисунков, в образовавшихся фрагментах содержится 2 крупных макромолекулы с числом мономерных звеньев $\geq 0,85 \frac{N}{2}$ при

скорости соударения 6900 м/с и более (средняя квадратичная скорость относительного движения центров масс пар макромолекул составляет 7745 м/с).

При малых скоростях соударения макромолекул (2300 м/с и менее) возникают нелинейные образования, имеющие нерегулярную структуру.

Полученные результаты могут служить основой для построения кинетической модели для эволюции концентраций макромолекул с разным количеством мономерных звеньев.

Предложена численная модель, которая предназначена для выявления молекулярных весов образуемых фрагментов при соударении. Предложен способ уменьшения количества неизвестных функций в 4 раза по сравнению с полной системой уравнений механики мономерных звеньев, основанный на симметрии в предлагаемой постановке задачи. Численно исследовано влияние взаимной ориентации макромолекул олигомеров на количество образуемых фрагментов.

Выявлено, что наименьшее количество фрагментов (2 фрагмента) образуется при соударении с высокой скоростью, более чем в 2,9 раза превышающей среднюю квадратичную, и угле взаимной ориентации макромолекул, близком к прямому.

При малой скорости соударения (в более чем 3 раза меньшей средней квадратичной) образуется множество фрагментов с нерегулярной структурой.

Полученные результаты могут служить ориентиром для развития макроскопической кинетической модели эволюции фракционного состава мономерных звеньев (эволюции концентраций мономерных звеньев различных типовых весов).

Список литературы

1. Naeimirad, M. Fabrication and characterization of silicon carbide/epoxy nanocomposite using silicon carbide nanowhisker and nanoparticle reinforcements [Текст] / M. Naeimirad, A. Zadhoush, R.E. Neisiany // Journal of Composite Materials. – 2015. – P. 1–12.
2. Kasaai, M.R. Fragmentation of chitosan by ultrasonic irradiation [Текст] / M.R. Kasaai, J. Arul, G. Charlet // Ultrasonic Sonochemistry. – Ultrasonics

- Sonochemistry. – 2008. – 15. – P. 1001–1008.
3. Gonza'lez, M.G. Applications of FTIR on Epoxy Resins -Identification, Monitoring the Curing Process, Phase Separation and Water Uptake [Текст] / M.G. Gonza'lez, J.C. Cabanelas, J. Baselga // Infrared Spectroscopy-Materials Science, Engineering and Technology. – 2012.
 4. Legon, A.C. A reduced radial potential energy function for the halogen bond and the hydrogen bond in complexes B...XY and B...HX, where X and Y are halogen atoms [Текст] / A.C. Legon // Phys. Chem. Chem. Phys., 2014. – 16. – P. 12415–12421.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ БАЛАНСИРОВКИ ОБУЧАЮЩИХ ВЫБОРОК ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ ИСКУССТВЕННОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ, ПРОГНОЗИРУЮЩЕЙ ОСЛОЖНЕНИЯ И ИСХОДЫ ИНФАРКТА МИОКАРДА

М. Г. Доррер¹, С.Е. Головенкин²

¹Сибирский государственный университет науки и технологий им. М.Ф.

Решетнева, *dorrer_mg@sibsau.ru*

²Красноярский государственный медицинский университет. имени профессора

В.Ф.Войно-Ясенецкого

gse2008@mail.ru

Введение

В работе рассматривается вопрос эффективности методов дополнения несбалансированных выборок данных для решения задач прогнозирования динамики самообучающимися системами организма человека в условиях сердечно-сосудистых заболеваний. Решение таких задач в большом количестве случаев затрудняется тем, что данные несбалансированы, классы типа «наличия диагноза» как правило находятся в меньшинстве в обучающей выборке, а следовательно подавляющее большинство алгоритмов машинного обучения «переучиваются», начиная все случаи интерпретировать как отрицательные. Предметом данной статьи было сравнение эффективности нескольких методов повышения эффективности использования данных малого объема – метод скользящего обучения, метод балансировки выборки путем дополнения копиями случайных записей и метод балансировки путем дополнения выборки примерами, сгенерированными на основе совокупности всех примеров миноритарного класса (SMOTE). При оценке качества прогноза использовались показатели матрицы ошибок (confusion matrix), применяющиеся как в машинном обучении, так и в диагностике для оценки качества диагностических методик. Исследование велось на базе данных пациентов, перенесших инфаркт миокарда, решалась задача предсказания последствий на основе данных о пациенте.

Примененные алгоритмы дополнения данных показали очень близкие результаты – средняя по всем диагнозам точность составила около 83%, при этом показатели чувствительности составили 85% а специфичности – 84%, что позволяет говорить о существенном повышении качества прогноза по сравнению с более ранними методами подхода. Полученный результат позволяет говорить о высокой эффективности примененных методов для дополнения несбалансированных выборок при решении задач прогнозирования динамики организма человека в условиях последствий сердечно-сосудистых заболеваний.

Введение

Заболевания сердца и кровеносных сосудов являются основной причиной смерти в большинстве экономически развитых стран. Ежегодно от этой патологии умирает около 17 миллионов человек [1]. В России на протяжении нескольких десятилетий сердечно-сосудистые заболевания, как и в других странах, являются ведущей причиной смертности среди населения (50.1%) [2], [3], [4]. Таким образом, ранняя диагностика сердечных заболеваний может значительно снизить нежелательную статистику инвалидизации и смертности пациентов.

Вместе с тем, начиная с 90-х годов и по настоящее время идет активное внедрение методов машинного обучения в медицинские информационные системы. В первую очередь, это обусловлено необходимостью анализа большого объема информации о пациентах в режиме реального времени (сведений о изменении состояния здоровья, результатов лабораторных и инструментальных методов исследования), а также прогнозирования возможных сценариев развития заболеваний в течение заданного временного интервала.

Для решения задач прогнозирования особенностей течения и последствий заболеваний, включая, сердечно-сосудистые, все чаще применяются такие методы машинного обучения, как искусственные нейронные сети (ИНС) [5]. Эффективные инструменты прогнозирования обращения за медицинской амбулаторной помощью и необходимости госпитализации позволяют своевременно и всесторонне оценить риск имеющихся болезней и новых

заболеваний, что способствует выбору наиболее рациональной врачебной тактики в части профилактических мер или своевременному лечению болезни на ранних стадиях ее развития. Таким образом, снижается риск осложнений и преждевременной смерти. Врачам-клиницистам важно иметь в своем арсенале диагностических средств максимально точный и эффективный инструмент прогнозирования, базирующийся на доступной информации о пациентах: демографических и анамнестических данных, сведениях о ранее перенесенных заболеваниях, результатах.

Поиски эффективных инструментов прогнозирования сердечно-сосудистых заболеваний вызваны стремлением выявить пациентов высокого риска с целью как можно раньше принять необходимые меры профилактики и лечения и таким образом снизить показатели инвалидизации и смертности пациентов.

Авторы данной работы неоднократно обращались к теме прогнозирования последствий инфаркта миокарда (см., например, работы [6] и [7]) на основе открытой базы данных историй болезней пациентов, перенесших инфаркт [8]. Предлагаемая работа направлена на улучшение ранее полученных в работе [9] результатов в части чувствительности и избирательности применяемых моделей при решении данной задачи.

Связанные работы

Рассмотрение публикаций, посвященных общим подходам применения машинного обучения и искусственных нейронных сетей для решения медицинских задач приведено авторами в работе [9]. Остановимся подробнее на работах, посвященных проблеме обучения нейронных сетей на несбалансированных учебных выборках.

Так, в работе [10] описано применение ИНС для диагностики аномалий ходьбы, авторы показывают, как избежать трудностей при ограниченном количестве доступных записей данных, необходимых для повышения эффективности алгоритмов вывода.

Авторы работы [11] предлагают методы применения машинного обучения

для несбалансированных наборов данных в медицинской диагностике.

В статье [12] исследуется влияние дисбаланса классов в обучающих датасетах при разработке классификаторов нейронных сетей для компьютерной медицинской диагностики.

В статье [13] разбирается вопрос снижения ошибки нейронной сети, обученной для медицинской диагностики, на датасетах с низкой распространенностью заболевания.

Авторы статьи [14] предложили метод обучения, основанный на чувствительном к затратам расширении метода наименьших квадратов (LMS) алгоритм, который балансирует ошибки классификации миноритарных классов за счет уменьшения веса ошибки мажоритарных классов обучающих выборок.

Таким образом, проблема работы с несбалансированными выборками при решении задач машинного обучения в медицинской диагностике продолжает сохранять актуальность.

Экспериментальные данные

В качестве исходных данных для обучения нейронной сети использовалась база данных осложнений инфаркта миокарда [8]. Эта база содержит данные историй болезней больных, перенесших инфаркт миокарда с различными осложнениями. База собрана в 1992-1995 гг. в Красноярске и снабжена соответствующим описанием.

Ставилась задача предсказания следующих исходов заболевания, закодированных в полях базы данных [14]:

- 1.A_V_BLOK – (Third-Degree Atrioventricular Block ECG);
- 2.DRESSLER – Синдром Дресслера (Dressler syndrome);
- 3.FIBR_JELUD – Фибрилляция желудочков (Ventricular fibrillation);
- 4.FIBR_PREDS – Мерцательная аритмия (Atrial fibrillation);
- 5.JELUD_TAH – Желудочковая тахикардия (Ventricular tachycardia);
- 6.LET_IS – Смертельный исход (Lethal outcome);
- 7.OTEK_LANC – Отек легких (Pulmonary edema);
- 8.P_IM_STEN – Постинфарктная стенокардия (Post-infarction angina);

- 9.PREDS_TAH – Суправентрикулярная тахикардия (Supraventricular tachycardia);
- 10.RAZRIV – Разрыв миокарда (Myocardial rupture);
- 11.REC_IM – Рецидив инфаркта миокарда (Relapse of the myocardial infarction);
- 12.ZSN – Хроническая сердечная недостаточность (Chronic heart failure).
- 13.LET_IS – варианты летального исхода, среди которых выделяются следующие:
1. кардиогенный шок;
 2. отек легких;
 3. разрыв миокарда;
 4. прогрессирование застойной сердечной недостаточности;
 5. тромбоэмболия;
 6. асистолия;
 7. фибрилляция желудочков.

Применяемые методы исследования

Предсказание диагнозов предполагалось осуществлять при помощи программных моделей искусственных нейронных сетей на базе архитектуры, описанной в работе [9] на базе нейросетевой библиотеки Keras [15]. Сеть строится на базе объекта типа сети Sequential и полносвязных слоев Dense и вспомогательного слоя Dropout.

Примерная архитектура сети, показанная при помощи функции model.summary() показана на рис. 1.

Используемые метрики точности диагноза

Как правило, результаты решения проблемы двоичной классификации помечены как положительные и негативные. Эти решения могут быть представлены в матрице ошибок (Confusion Matrix) (рис. 2), которая содержит 4 ячейки [18].

Model: "sequential_01"

Layer (type)	Output Shape	Param #
=====		
=====		
dense_01 (Dense)	(None, 100)	11000
dropout_01 (Dropout)	(None, 100)	0
dense_02 (Dense)	(None, 50)	5050
dropout_02 (Dropout)	(None, 50)	0
dense_03 (Dense)	(None, 25)	1275
dropout_03 (Dropout)	(None, 25)	0
dense_04 (Dense)	(None, 1)	26
=====		
=====		
Total params: 17,351		
Trainable params: 17,351		
Non-trainable params: 0		

Рис 1. Архитектура ИНС, используемая для прогноза.

- Истинно-положительные (TP), объекты, которые были классифицированы как положительные и действительно являются положительными (принадлежащими к данному классу);
- Верно-отрицательные (TN) объекты, которые были классифицированы как отрицательные и действительно отрицательные (не принадлежат к данному классу);
- Истинно-положительные (FP) объекты, которые были классифицированы как положительные, но фактически отрицательные;
- Ложно-отрицательные (FN) объекты, которые были классифицированы как отрицательные, но фактически положительные;

Категория i		Экспертная оценка	
		Положительная	Отрицательная
Оценка системы	Положительная	TP	FP
	Отрицательная	FN	TN

Рис 2. Матрица ошибок.

На основе матрицы ошибок и её значений, рассчитываются различные метрики классификационной способности алгоритма. Для различных классификационных задач, включая диагностику заболеваний, используются следующие метрики: Общая точность предсказания (ассигасу), Точность (precision), Полнота (recall), Специфичность (TNR-ratio). Следует отметить, что данный набор показателей используется как при оценке методов машинного обучения [18], так и для оценки качества диагностических методик в доказательной медицине [19].

Общая точность предсказания (accuracy) – отношение всех правильных прогнозов к общему числу всех предсказанных образцов. В ряде задач ассигасу может являться неинформативной.

$$Accuracy = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN} \quad (1)$$

Точность (precision) – доля прогнозируемых положительных результатов, которые являются действительно истинно-положительными результатами для всех положительно предсказанных объектов.

$$Precision = \frac{TP}{TP + FP} \quad (2)$$

Полнота (recall) – пропорция всех истинно-положительно предсказанных объектов к общему количеству действительно положительных.

$$Recall = \frac{TP}{TP + FN} \quad (3)$$

Этой же формулой оценивается такая метрика, как чувствительность (sensitivity), общее название для этих метрик – True positive rate или TPR (оценка истинно положительных) и Probability of detection (вероятность выявления).

Специфичность (TNR-ratio) – отношение между верно

классифицированных негативных экземпляров к числу всех негативных экземпляров.

$$TNR - ratio = \frac{TN}{TN + FP} \quad (4)$$

Поскольку все диагнозы описаны в числовом формате, в котором 0 – диагноз отсутствует, 1 – диагноз ставится, постольку ошибка нейронной сети оценивалась по функции бинарной кроссэнтропии.

Дополнение и балансировка базы данных

С целью повышения эффективности использования данных используемой базы данных обучение производилось методом «скользящего окна». Данный метод заключается в исключении из обучающей выборки лишь одного примера исходной базы данных и тестировании обученной нейронной сети на исключенном примере. Таким образом, для одного сеанса необходимо обучение числа нейронных сетей, равного числу примеров обучающей выборки.

Специфика базы данных [8] заключается в том, что по данные по каждому из диагнозов являются достаточно разреженными – в среднем из 1700 записей в базе данных каждый из диагнозов ставится 90 раз. Такая ситуация существенно затрудняет обучение нейронных сетей с учителем, вызывая эффект «переучивания», когда сеть обучается на наиболее часто встречающийся ответ – отсутствие диагноза. Для преодоления данной проблемы в части экспериментов была применены следующие методы дополнения данных.

1. Использование метода скользящего окна (описано, например, в работе [9]).
2. Использования случайного копирования экземпляров миноритарных классов [16]
3. Использование метода синтетического пополнения миноритарных классов (SMOTE) [17].

Процедура метода скользящего окна, реализованная на языке Python, приведена на Рис. 2. Следует отметить, что она включает в себя действия по исключению тестируемого примера, дополнение данных по выбранному методу

и тестирование сети на тестовом примере. Далее данная процедура вызывается в качестве лямбда-функции для каждой строки датафрейма, считанного из файла БД [8].

```
def TeachSMOTESampling(workrow, dataset, model, W_init, N_out, OutY):  
    TempDF = dataset.drop(dataset[dataset.ID == workrow.ID].index)  
    TempX=TempDF.iloc[:,0:len(TempDF.columns)-N_out]  
    TempY=TempDF.iloc[:,len(TempDF.columns)-N_out:len(TempDF.columns)]  
    sm = SMOTE()  
    x_res, y_res = sm.fit_resample(TempX, TempY)  
    subrow=workrow[0:len(TempDF.columns)-N_out]  
    testdata=pd.DataFrame([subrow])  
    model.set_weights(W_init)  
    model.fit(x_res,y_res,epochs=100,batch_size=len(x_res),verbose=0, shuffle=True)  
    predictions=model.predict(testdata).round()  
    OutY.append(predictions)
```

Рис 2. Процедура тестирования сети по методу скользящего окна, обучающая выборка дополнена по методу SMOTE.

Авторы ставили задачи сравнить эффективность дополнения примеров миноритарных классов при помощи стандартных метрик качества прогностических методов.

Результаты

В таблицах 1-4 приведены результаты диагностики тестовых (не включенных в обучающую выборку) пациентов в формате значений показателей матрицы ошибок и вычисляемых на ее основе показателей качества диагностики для каждого из вариантов дополнения данных, рассмотренных ранее в соответствующем разделе.

Таблица 1

Оценка точности прогноза при работе с недополненными данными без
скользящего окна.

Прогнозируемый диагноз БД [8]	Показатели матрицы ошибок				Показатели качества классификации			
	TP	TN	FP	FN	Accurac y	Precisi on	Recal l	TNR- ratio
B_BLOK_S_n	298	0	42	0	87,6%	87,6%	100,0 %	0,0%
ANT_CA_S_n	103	0	237	0	30,3%	30,3%	100,0 %	0,0%
GEPAR_S_n	96	0	244	0	28,2%	28,2%	100,0 %	0,0%
ASP_S_n	90	0	250	0	26,5%	26,5%	100,0 %	0,0%
TIKL_S_n	334	0	6	0	98,2%	98,2%	100,0 %	0,0%
TRENT_S_n	270	0	70	0	79,4%	79,4%	100,0 %	0,0%
FIBR_PREDS	303	0	37	0	89,1%	89,1%	100,0 %	0,0%
PREDS_TAH	337	0	3	0	99,1%	99,1%	100,0 %	0,0%
JELUD_TAH	334	0	6	0	98,2%	98,2%	100,0 %	0,0%
FIBR_JELUD	332	0	8	0	97,6%	97,6%	100,0 %	0,0%
A_V_BLOK	328	0	12	0	96,5%	96,5%	100,0 %	0,0%
OTEK_LANC	308	0	32	0	90,6%	90,6%	100,0	0,0%

							%	
RAZRIV	328	0	12	0	96,5%	96,5%	100,0 %	0,0%
DRESSLER	324	0	16	0	95,3%	95,3%	100,0 %	0,0%
ZSN	261	0	79	0	76,8%	76,8%	100,0 %	0,0%
REC_IM	309	0	31	0	90,9%	90,9%	100,0 %	0,0%
P_IM_STEN	316	0	24	0	92,9%	92,9%	100,0 %	0,0%
LET_IS_0.0	60	0	280	0	17,6%	17,6%	100,0 %	0,0%
LET_IS_1.0	314	0	26	0	92,4%	92,4%	100,0 %	0,0%
LET_IS_2.0	333	0	7	0	97,9%	97,9%	100,0 %	0,0%
LET_IS_3.0	328	0	12	0	96,5%	96,5%	100,0 %	0,0%
LET_IS_4.0	337	0	3	0	99,1%	99,1%	100,0 %	0,0%
LET_IS_5.0	338	0	2	0	99,4%	99,4%	100,0 %	0,0%
LET_IS_6.0	333	0	7	0	97,9%	97,9%	100,0 %	0,0%
LET_IS_7.0	337	0	3	0	99,1%	99,1%	100,0 %	0,0%
Среднее					83,0%	83,0%	100,0 %	0,0%

Таблица 2

Оценка точности прогноза при работе с исходной таблицей
данных по методу скользящего окна.

Прогнозируемый диагноз БД [8]	Показатели матрицы ошибок				Показатели качества классификации			
	TP	TN	FP	FN	Accuracy	Precision	Recall	TNR- ratio
B_BLOK_S_n	1 485	0	215	0	87,4%	87,4%	100,0 %	0,0%
ANT_CA_S_n	0	56 2	0	1 138	33,1%	0,0%	0,0%	100,0%
GEPAR_S_n	0	48 0	0	1 220	28,2%	0,0%	0,0%	100,0%
ASP_S_n	0	43 1	0	1 269	25,4%	0,0%	0,0%	100,0%
TIKL_S_n	1 670	0	30	0	98,2%	98,2%	100,0 %	0,0%
TRENT_S_n	1 359	0	341	0	79,9%	79,9%	100,0 %	0,0%
FIBR_PREDS	1 530	0	170	0	90,0%	90,0%	100,0 %	0,0%
PREDS_TAH	1 680	0	20	0	98,8%	98,8%	100,0 %	0,0%
JELUD_TAH	1 658	0	42	0	97,5%	97,5%	100,0 %	0,0%
FIBR_JELUD	1 629	0	71	0	95,8%	95,8%	100,0 %	0,0%
A_V_BLOK	1 643	0	57	0	96,6%	96,6%	100,0 %	0,0%
OTEK_LANC	1	0	159	0	90,6%	90,6%	100,0	0,0%

	541						%	
RAZRIV	1 646	0	54	0	96,8%	96,8%	100,0 %	0,0%
DRESSLER	1 625	0	75	0	95,6%	95,6%	100,0 %	0,0%
ZSN	1 306	0	394	0	76,8%	76,8%	100,0 %	0,0%
REC_IM	1 541	0	159	0	90,6%	90,6%	100,0 %	0,0%
P_IM_STEN	1 552	0	148	0	91,3%	91,3%	100,0 %	0,0%
LET_IS_0.0		27 0		1 429				
LET_IS_1.0	1 590	0	110	0	93,5%	93,5%	100,0 %	0,0%
LET_IS_2.0	1 682	0	18	0	98,9%	98,9%	100,0 %	0,0%
LET_IS_3.0	1 646	0	54	0	96,8%	96,8%	100,0 %	0,0%
LET_IS_4.0	1 677	0	23	0	98,6%	98,6%	100,0 %	0,0%
LET_IS_5.0	1 688	0	12	0	99,3%	99,3%	100,0 %	0,0%
LET_IS_6.0	1 673	0	27	0	98,4%	98,4%	100,0 %	0,0%
LET_IS_7.0	1 673	0	27	0	98,4%	98,4%	100,0 %	0,0%
Среднее					82,9%	78,8%	84,0 %	16,0%

Таблица 3

Оценка точности прогноза по методу скользящего окна с дополнением обучающей выборки по методу копирования случайных примеров миноритарного класса.

Прогнозируемый диагноз БД [8]	Показатели матрицы ошибок				Показатели качества классификации			
	TP	TN	FP	FN	Accuracy	Precision	Recall	TNR-ratio
B_BLOK_S_n	613	87 2	47	16 8	87,4%	92,9%	78,5%	94,9%
ANT_CA_S_n	338	22 4	597	54 1	33,1%	36,1%	38,5%	27,3%
GEPAR_S_n	167	31 3	276	94 4	28,2%	37,7%	15,0%	53,1%
ASP_S_n	139	29 2	287	98 2	25,4%	32,6%	12,4%	50,4%
TIKL_S_n	762	90 8	7	23	98,2%	99,1%	97,1%	99,2%
TRENT_S_n	506	85 3	122	21 9	79,9%	80,6%	69,8%	87,5%
FIBR_PREDS	1 028	50 2	90	80	90,0%	91,9%	92,8%	84,8%
PREDS_TAH	1 526	15 4	19	1	98,8%	98,8%	99,9%	89,0%
JELUD_TAH	987	67 1	19	23	97,5%	98,1%	97,7%	97,2%
FIBR_JELUD	769	86 0	21	50	95,8%	97,3%	93,9%	97,6%
A_V_BLOK	1 397	24 6	41	16	96,6%	97,1%	98,9%	85,7%

OTEK_LANC	926	61 5	68	91	90,6%	93,2%	91,1%	90,0%
RAZRIV	919	72 7	15	39	96,8%	98,4%	95,9%	98,0%
DRESSLER	726	89 9	22	53	95,6%	97,1%	93,2%	97,6%
ZSN	684	62 2	152	24 2	76,8%	81,8%	73,9%	80,4%
REC_IM	1 058	48 3	94	65	90,6%	91,8%	94,2%	83,7%
P_IM_STEN	374	1 17 8	36	11 2	91,3%	91,2%	77,0%	97,0%
LET_IS_0.0	175	96	507	92 2	15,9%	25,7%	16,0%	15,9%
LET_IS_1.0	1 354	23 6	35	75	93,5%	97,5%	94,8%	87,1%
LET_IS_2.0	1 201	48 1	8	10	98,9%	99,3%	99,2%	98,4%
LET_IS_3.0	938	70 8	15	39	96,8%	98,4%	96,0%	97,9%
LET_IS_4.0	1 211	46 6	11	12	98,6%	99,1%	99,0%	97,7%
LET_IS_5.0	1 532	15 6	12	0	99,3%	99,2%	100,0%	92,9%
LET_IS_6.0	1 335	33 8	15	12	98,4%	98,9%	99,1%	95,8%
LET_IS_7.0	826	84 7	12	15	98,4%	98,6%	98,2%	98,6%
Среднее					82,9%	85,3%	80,9%	83,9%

Таблица 4

Оценка точности прогноза по методу скользящего окна с дополнением обучающей выборки с помощью алгоритма SMOTE.

Прогнозируемый диагноз БД [8]	Показатели матрицы ошибок				Показатели качества классификации			
	TP	TN	FP	FN	Accurac y	Precisi on	Recall	TNR- ratio
B_BLOK_S_n	615	87 0	49	16 6	87,4%	92,6%	78,7%	94,7%
ANT_CA_S_n	349	21 3	609	52 9	33,1%	36,4%	39,7%	25,9%
GEPAR_S_n	170	31 0	281	93 9	28,2%	37,7%	15,3%	52,5%
ASP_S_n	173	25 8	394	87 5	25,4%	30,5%	16,5%	39,6%
TIKL_S_n	755	91 5	8	22	98,2%	99,0%	97,2%	99,1%
TRENT_S_n	509	85 0	128	21 3	79,9%	79,9%	70,5%	86,9%
FIBR_PREDS	1 017	51 3	89	81	90,0%	92,0%	92,6%	85,2%
PREDS_TAH	1 204	47 6	19	1	98,8%	98,4%	99,9%	96,2%
JELUD_TAH	972	68 6	20	22	97,5%	98,0%	97,8%	97,2%
FIBR_JELUD	787	84 2	20	51	95,8%	97,5%	93,9%	97,7%
A_V_BLOK	1 406	23 7	43	14	96,6%	97,0%	99,0%	84,6%

OTEK_LANC	933	60 8	70	89	90,6%	93,0%	91,3%	89,7%
RAZRIV	958	68 8	15	39	96,8%	98,5%	96,1%	97,9%
DRESSLER	699	92 6	24	51	95,6%	96,7%	93,2%	97,5%
ZSN	688	61 8	152	24 2	76,8%	81,9%	74,0%	80,3%
REC_IM	1 055	48 6	94	65	90,6%	91,8%	94,2%	83,8%
P_IM_STEN	383	1 16 9	36	11 2	91,3%	91,4%	77,4%	97,0%
LET_IS_0.0	170	10 1	510	91 9	15,9%	25,0%	15,6%	16,5%
LET_IS_1.0	1 350	24 0	35	75	93,5%	97,5%	94,7%	87,3%
LET_IS_2.0	1 184	49 8	8	10	98,9%	99,3%	99,2%	98,4%
LET_IS_3.0	972	67 4	16	38	96,8%	98,4%	96,2%	97,7%
LET_IS_4.0	1 245	43 2	12	11	98,6%	99,0%	99,1%	97,3%
LET_IS_5.0	1 246	44 2	11	1	99,3%	99,1%	99,9%	97,6%
LET_IS_6.0	1 356	31 7	15	12	98,4%	98,9%	99,1%	95,5%
LET_IS_7.0	786	88 7	11	16	98,4%	98,6%	98,0%	98,8%
Среднее					82,9%	85,1%	81,2%	83,8%

Обсуждение и выводы

Полученные результаты прогнозирования подтверждают вывод работы [9] –искусственная нейронная сеть, обученная на предыдущем клиническом опыте, обладает достаточно высокой прогностической способностью по предсказанию исходов инфаркта миокарда, достигающей 82-84% общей точности. Таким образом, даже база скромного объема (1700 записей) позволяет обучать нейронные сети, позволяющие достаточно точно прогнозировать исходы заболевания.

При этом методы дополнения данных позволили получить нейросети, обладающие не только высокой точностью, но и достаточно высокими избирательностью (85%) и специфичностью (83-84%), то есть задача исследования – решить проблему, выявленную в статье [9] – была решена.

Сравнение методов балансировки выборок не показало однозначного преимущества сравниваемых методов дополнения выборок. Показатели точности, избирательности и специфичности полученных нейронных сетей на базе датасетов, дополненных двумя различными методами различаются буквально в третьей значащей цифре. Можно говорить о том, что любой из этих методов дает приемлемые результаты при балансировке обучающего датасета.

Список литературы

1. Townsend N. et al. Cardiovascular disease in Europe: epidemiological update 2016 // Eur. Heart J. 2016. Vol. 37, № 42. P. 3232–3245.
2. The Demographic Yearbook of Russia. 2015: Statistical Handbook. Moscow: Rosstat, 2015.
3. Boytsov, S. Samorodskaya, I. Starinskaya, M. Semenov, V. Kakorina E. ANALYSIS OF STRUCTURE AND DYNAMICS OF INDICATORS OF MORTALITY FROM CARDIOVASCULAR DISEASES IN RUSSIA IN 2006 AND 2014 // Russ. J. Prev. Med. 2016. Vol. 19 (2). P. 11–12.
4. Boytsov, S. Deev, A. Shalnova S. Mortality and risk factors for non-communicable diseases in Russia: Specific features, trends, and prognosis // Ter.

- Arkh. 2017. Vol. 89, № 1. P. 5–13.
5. Gorban A.N. et al. Medical, psychological and physiological applications of MultiNeuron neural simulator // International RNNS/IEEE Symposium on Neuroinformatics and Neurocomputers. 1995.
 6. Rossiev D.A. et al. Neural networks for forecasting of myocardial infarction complications // The Second International Symposium on Neuroinformatics and Neurocomputers. IEEE. P. 292–298.
 7. Golovenkin S.E. et al. Evaluation of the effectiveness of using artificial intelligence to predict the response of the human body to cardiovascular diseases // J. Phys. Conf. Ser. {IOP} Publishing, 2020. Vol. 1679. P. 42017.
 8. Golovenkin S.E. et al. Myocardial infarction complications Database. University of Leicester, 2020.
 9. Dorrer M.G. et al. Selection of neural network architecture and data augmentation procedures for predicting the course of cardiovascular diseases // J. Phys. Conf. Ser. 2021. Vol. 2094, № 3. P. 032037.
 10. Li J. et al. A Systematic Collection of Medical Image Datasets for Deep Learning. 2021.
 11. Mena L., Gonzalez J. Machine Learning for Imbalanced Datasets: Application in Medical Diagnostic. // FLAIRS 2006 - Proceedings of the Nineteenth International Florida Artificial Intelligence Research Society Conference. 2006. Vol. 2006. P. 574–579.
 12. Mazurowski M.A. et al. Training neural network classifiers for medical decision making: The effects of imbalanced datasets on classification performance // Neural Networks. 2008. Vol. 21, № 2–3. P. 427–436.
 13. Frolov V. Imbalanced Classification for Medical Diagnosis [Electronic resource] // Analytics Vidhya. 2020. URL: <https://medium.com/analytics-vidhya/imbalanced-classification-for-medical-diagnosis-75dfcaa783d3>.
 14. Belarouci S., Chikh M.A. Medical imbalanced data classification // Adv. Sci. Technol. Eng. Syst. J. 2017. Vol. 2, № 3. P. 116–124.
 15. Keras [Electronic resource]. URL: <https://keras.io/>.

16. Sunter A.B. List Sequential Sampling with Equal or Unequal Probabilities without Replacement // Appl. Stat. 1977. Vol. 26, № 3. P. 261.
17. Chawla N. V. et al. SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique. 2011.
18. Ohsaki M. et al. Confusion-Matrix-Based Kernel Logistic Regression for Imbalanced Data Classification // IEEE Trans. Knowl. Data Eng. 2017. Vol. 29, № 9. P. 1806–1819.
19. Greenhalgh T. How to Read a Paper: The Basics of Evidence-Based Medicine. 1997.
20. Dorrer M.G. et al. Using artificial intelligence to predict the human body's response to cardiovascular disease // J. Phys. Conf. Ser. {IOP} Publishing, 2020. Vol. 1679. P. 42012.

РАВНОВЕСНОЕ ТЕРМОДИНАМИКО-ЦЕПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ⁶

Каганович Б.М., 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, max@isem.irk.ru, barakhtenko@isem.irk.ru

Равновесная термодинамика и теория цепей совместно используются авторами в исследованиях сжигания и переработки топлив; загрязнения природы; кондиционирования воздуха в помещениях; трубопроводного, колесного, водного и воздушного транспорта и решении ряда других задач [1–4]. Применение обязательно потенциального одномерного цепного пространства переменных значительно облегчает построение требуемых моделей. Возможности равновесного моделирования сильно увеличиваются с развитием вычислительной техники и методов математического программирования.

Изменение условий создания новых алгоритмов расчетов требует внимательного анализа их конкурентности, выявления сравнительных достоинств и недостатков. Сейчас широко распространено мнение о принципиальной неприменимости равновесного объяснения явлений необратимости. Его неправильность следует уже из третьего ньютоновского закона равенства действия и противодействия. Трудность применения обуславливается часто встречающимися случаями воздействия на исследуемую систему не поддающихся строгой математической формулировке сил, что и приводит к включению в описание не формализованных элементов (коэффициентов в формулах величин, дополнительных равенств или неравенств). Трудности уменьшаются благодаря переходу к многошаговым вычислительным процессам. На ничтожно малых шагах обычно удается добиться неизменности вида используемых функций и резко упростить формулы проводимых вычислений. При переходе от одного шага к другому эти формулы

⁶ Работа выполнена в рамках проекта государственного задания (№ FWEU-2021-0002) программы

оказывается допустимым подвергать изменениям.

Опыт равновесного моделирования необратимых процессов начал накапливаться в Институте систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН (ИСЭМ СО РАН) с момента его создания в 1960 г. в работах В.Я. Хасилева и его ученика А.П. Меренкова [5]. Хасилев стал основоположником теории гидравлических цепей [6]. Им и Меренковым эта теория использовалась в оптимизации схем и параметров трубопроводных сетей. Благодаря одномерности цепного пространства результаты их расчетов удалось представить строго соответствующими принципам и равновесности, и экстремальности.

Авторы данного доклада от одномерного цепного моделирования Хасилева и Меренкова перешли к термодинамико-цепному, что привело к существенному расширению области применимости равновесного анализа. Для иллюстрации эффективности предлагаемого способа научных исследований кратко изложим пример его применения более детально уже обсуждавшийся в [7]. На этом примере здесь необходимо наряду с реальными цепными схемами использовать и условные.

Рассмотрена задача расчета гидравлического удара в вязкой жидкости произошедшего в сети, схемы которой представлены на рис. Моделируемый процесс разбит на три стадии: стационарное движение до перекрытия потока в точке b ; мгновенное торможение и гидравлический удар в жидкости, ставшей из-за невозможности мгновенного проявления действия трения идеальной; стационарного движения жидкости вновь ставшей вязкой после образования в точке удара разрыва трубопровода. Первая и третья стадии рассчитывались с помощью основной в термодинамико-цепных исследованиях авторов модели экстремальных промежуточных состояний (МЭПС). Для первой и третьей стадий эта модель записывалась в виде:

$$\begin{array}{ll} \text{найти} & \max P \sum_{i=1}^n x_i \end{array} \quad (1)$$

$$\begin{array}{ll} \text{при условиях} & Ax = 0, \end{array} \quad (2)$$

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

где $x = (x_1, \dots, x_n)$ – вектор расходов на ветвях; P – давление, создаваемое нагнетателем; $A = [a_{ij}] - (m-1) \times n$ – матрица соединений независимых узлов и ветвей, $a_{ij} = 1$, если поток на i -ой ветви согласно заданному направлению подходит к j -му узлу, $a_{ij} = -1$, если поток отходит от j -го узла, и $a_{ij} = 0$, – когда узел j не принадлежит i -ой ветви; m – число узлов; n – число ветвей; z_i – сопротивление i -ой ветви. Результаты расчетов сведены в таблицу.

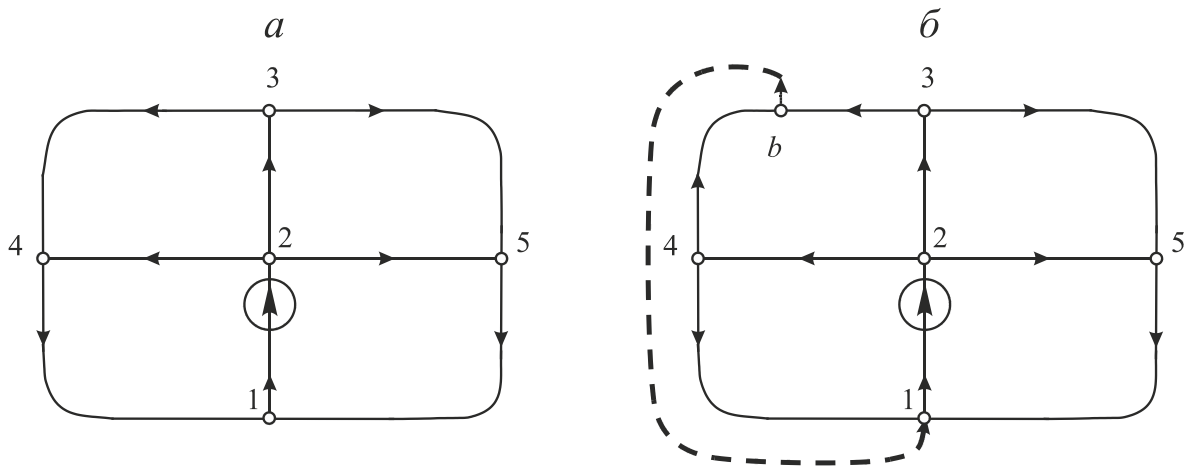


Рис. Схемы гидравлической цепи: исходная (а) и условная третьей (послеударной) стадии процесса (б).  – источник движущего давления; b – точка мгновенного торможения потока; - - - - условная линия движения потока между точкой разрыва и узлом 1.

Табличные данные позволяют углубить понимание достоинств равновесного, пошагового, стационарного моделирования. Вместо анализа непрерывного перехода от одного к другому резко отличному состоянию на основе какого-либо уравнения неизвестной точности здесь из простейших универсальных и достаточно точных зависимостей определяются конечные равновесные состояния последовательно рассчитываемых стадий. Различия достигаемых состояний определяют содержательность не только

формализованной, но и неформализованной, «субъективной» составляющей термодинамического анализа. Субъективизм связан с оценкой упорядоченности проходимых гидравлической системой состояний и периодов (моментов) движения.

В рассматриваемом примере обнаружился переход на ветви 3-5 в связи с резким уменьшением объёмного расхода (более чем на три порядка) в послеаварийной ситуации от турбулентного режима течения к ламинарному (изменению показателя степени β в уравнении (3) от двух до единицы). Этот переход можно однозначно трактовать как понижение уровня порядка. Ведь при ламинарном движении жидкость обладает меньшей степенью свободы и возможностью обмена энергией с окружением чем при турбулентном. Таким образом кроме непосредственного разрыва трубопровода из термодинамического анализа удалось выявить и другие последствия аварии.

Таблица

Потокораспределение на первой и третьей стадиях процесса

Ветвь	Диаметр ветви, <i>м</i>	Длина ветви, <i>м</i>	Скорость, <i>м/с</i>	Коэффициент сопротивления, <i>МПа·с²/м⁶</i>	Объёмный расход, <i>м³/с</i>	Потеря давления, <i>МПа</i>
Первая стадия						
1-2	1.2	1000	4.2	0.00488	4.8	0.11204
2-3	0.9	1000	2.1	0.02232	1.3	0.03886
3-5	0.5	2000	2.2	0.83657	0.5	0.17124
3-4	0.6	2000	2.9	0.33197	0.9	0.24949
2-5	0.7	1000	4.1	0.08208	1.6	0.21010
2-4	0.7	1000	4.8	0.08205	1.9	0.28835
4-1	0.8	2000	5.4	0.08154	2.7	0.61287
5-1	0.7	2000	5.3	0.16408	2.1	0.69111

Третья стадия						
1-2	1.2	1000	6.7	0.00487	7.6	0.27804
2-3	0.9	1000	5.2	0.02226	3.3	0.24503
3-5	0.5	2000	0.001	1.43129	0.0002	0.0000001
3-b	0.6	269	11.2	0.04454	3.3	0.49018
2-5	0.7	1000	4.5	0.08207	1.7	0.24503
2-4	0.7	1000	6.5	0.08201	2.5	0.51646
4-1	0.8	2000	3.2	0.08164	1.6	0.21876
5-1	0.7	2000	4.5	0.16414	1.7	0.49018
4-b	0.6	1731	2.9	0.28731	0.9	0.21876
b-1					4.2	

Примечание: ρ и P соответственно приняты равными 958.4 кг/м^3 и 1.01325 Мпа ; ударное давление $P=3.069 \text{ Мпа}$.

К настоящему времени в ИСЭМ уже выполнено большое количество работ, содержащих термодинамический анализ трубопроводных энергетических систем во многих городах страны. Но объем проводимых исследований необходимо увеличить. В качестве примера рассмотрим системы кондиционирования воздуха в жилых и производственных зданиях. В них у потребителей регулируется только температура воздуха. Содержание в нем вредных, загрязняющих его компонентов, требующих удаления, не определяется. Это, конечно, должно произойти в будущем. Экологическим анализом энергетических систем следует заняться многим специалистам. Много внимания проблемам экологии уделено в работах авторов.

Список литературы

1. 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.

2. Каганович Б.М., Филиппов С.П. Равновесная термодинамика и математическое программирование. – Новосибирск: Наука. Сибирская издательская фирма, 1995. – 236 с.
3. 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.
4. Kaganovich B.M., Stennikov V.A., Zarodnyuk M.S., Yakshin S.V. Conventional Hydraulic Circuits in an Analysis of Environmental Issues // E3S Web Conf. International Conference Green Energy and Smart Grids (GESG 2018) – 2018. – Vol 69. – 9 p. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/20186902003>
5. Меренков А.П., Хасилев В.Я. Теория гидравлических цепей. – М.: Наука, 1985. – 278 с.
6. Каганович Б.М., Меренков А.П., Балышев О.А. Элементы теории гетерогенных гидравлических цепей. – Новосибирск: Наука, 1997. – 120 с.
7. Каганович Б.М. Равновесная термодинамика. Проблемы и перспективы. Вторая редакция. – LAP Lambert Academic Publishing, Saarbrücken, 2015. – 240 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХ–СТУПЕНЧАТОЙ ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМОВ БАРИЯ ЧЕРЕЗ ВОЗБУЖДЕННОЕ $^3P_1$ СОСТОЯНИЕ

Н.И. Косарев

Сибирский федеральный университет,

Институт цветных металлов и материаловедения, *kosarev_nikolai@mail.ru*

Главная задача при получении ионного пучка для загрузки в магнито-оптическую ловушку (МОЛ) состоит в повышении эффективности ионизации атомов. Для атома бария предпочтительней на первой ступени фотовозбуждения использовать для накачки резонансную линию $^1S_0 \rightarrow ^1P_1$ ($\lambda_{res} = 553.5\text{nm}$). Однако, авторы работы [1] впервые демонстрировали эффективную загрузку ионного бариевого пучка в МОЛ, накачивая вместо резонансной линии слабую интеркомбинационную линию $6s^2\ ^1S_0 \leftrightarrow 6s6p\ ^3P_1$ ($\lambda_1 = 791\text{nm}$). После чего действие второго лазера на длине волны 337 nm ионизовало атомы. Данная схема получения фотоплазмы показала достаточно большую эффективность.

В представленной работе демонстрируются результаты численного моделирования кинетики двух–ступенчатой фотоионизации атомов бария и лазерно–индуцированной флуоресценции ионов. Многоуровневая модель атома бария описывается нестационарными уравнениями ударно–радиационного баланса и переноса излучения в линии с $\lambda_1 = 791\text{nm}$, накачка которой происходит первым лазером. После фотовозбуждения уровня $6s6p\ ^3P_1$ второй лазер с длиной волны $\lambda_2 = 310\text{nm}$ ионизует атомы. Метод лазерно–индуцированной флуоресценции использован для расчета фотоионизационного выхода (степень ионизации) ионов бария. Для этой цели моделируется воздействие на ионный пучок третьим пробным лазером, с частотой резонансной переходу в линии иона бария $^2S_{1/2} \leftrightarrow ^2P_{1/2}$ на длине волны $\lambda = 493.41\text{nm}$.

Атом бария состоял из десяти уровней, в соответствии с работами [2-4], обозначенных цифрами от 1 до 10: 1– основной уровень $^1S_0$; 2 – возбужденный уровень $^3P_1$; уровни 3–6 – метастабильные состояния $^1D_2$ и $^3D_{1,2,3}$; возбужденные

уровни 7–10 – $6s6p\ ^3P_1$, $5d6p\ ^1D_2$, $5d6p\ ^1P_1$, $6s7p\ ^1P_1$; ионизационное состояние 11. Скоростные уравнения ударно–радиационного баланса для описания кинетики двух–ступенчатой ионизации бария представлены системой уравнений (1). Первое уравнение описывает кинетику плотности атомов $n_1 = N_1/N_0$ в основном состоянии под действием процессов: фотовозбуждения и фототушения со скоростями $B_{17}(\int \phi_\nu J_\nu d\nu)$ $B_{71}(\int \phi_\nu J_\nu d\nu)$ соответственно, где B_{17} и B_{71} – коэффициенты Эйнштейна; спонтанный распад на основной уровень со скоростями Γ_i , $i = 2, 7, 9, 10$, N_1 – концентрация атомов на первом уровне, а N_0 – начальная концентрация атомов. Интеграл $\int \phi_\nu J_\nu d\nu$ есть интегральная по телесным углам и частоте интенсивность, формируемая под действием лазерного излучения и внутренних источников фотонов в среде, где $J_\nu = (1/4\pi) \oint_{\Omega} I d\omega$. k_{mi} и k_{im} коэффициенты возбуждения и девозбуждения уровней электронным ударом; s_m коэффициент ионизации электронным ударом. Второе уравнение системы (1) описывает кинетику плотности атомов на уровне 7 под действием следующих процессов: спонтанный распад, радиационное фотовозбуждение и фототушение лазерным излучением; электронный удар; ионизация электронами и лазерным излучением. Здесь F_7 поток фотонов ионизирующего лазера на длине волны $\lambda_2 = 310\text{ nm}$, $\sigma_i = 3.7 \times 10^{-17}\text{ cm}^2$ – сечение фотоионизации с уровня $^3P_1$ [5]. Третье уравнение системы (1) определяет кинетику остальных возбужденных уровней бария, включенных в модель. Последнее уравнение системы (1) описывает кинетику плотности электронов $n_e = N_e/N_0$, где N_e плотность электронов.

$$\left. \begin{aligned}
& \frac{dn_1}{dt} = -B_{17}(\int \phi_\nu J_\nu d\nu)n_1 + B_{71}(\int \phi_\nu J_\nu d\nu)n_7 + \\
& + \Gamma_{71}n_7 + \Gamma_{21}n_2 + \Gamma_{91}n_9 + \Gamma_{10,1}n_{10} + \sum_{i \neq 1}^{10} (k_{i1}N_i - k_{1i}N_1)n_e - s_1N_1n_e \\
& \frac{dn_7}{dt} = B_{17}(\int \phi_\nu J_\nu d\nu)n_1 - B_{71}(\int \phi_\nu J_\nu d\nu)n_7 - \\
& - \Gamma_{71}n_7 - \Gamma_{74}n_7 - \Gamma_{75}n_7 + \sum_{i \neq 7}^{10} (k_{i7}N_i - k_{7i}N_7)n_e - s_2N_2n_e - \sigma_i F_7 n_7 \\
& \frac{dn_m}{dt} = \sum_{i>m} \Gamma_{im}n_i - \sum_{i<m} \Gamma_{mi}n_m + \sum_{i \neq m} (k_{im}N_i - k_{mi}N_m)n_e - s_mN_mn_e, \\
& \quad (m = 2, \dots, 10, m \neq 7 \quad i = 1, 2, \dots, 10), \\
& \frac{dn_e}{dt} = \sum_{i=1}^{10} s_iN_in_e + \sigma_i F_7 n_7
\end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Начальные условия для уравнения (1) при $t_0 = 0$ следующие

$$n_e(r, t_0) = 0, \quad n_1(r, t_0) = 1, \quad n_m(r, t_0) = 0, \quad m = 2, 3, \dots, 10.$$

Система уравнений ударно-радиационной кинетики (1) дополнялась уравнением для электронной температуры T_e [eV] следующего вида

$$\begin{aligned}
\frac{dT_e}{dt} = & \frac{2}{3} \sum_{i>k}^n (k_{ik}N_i - k_{ki}N_k) \Delta E_{ki} - \sum_{i=1}^n \left(\frac{2}{3} J_i + T_e \right) S_i N_i - \\
& - \frac{2}{3} H_{ea} \sum_{i=1}^n N_i - \frac{2}{3} H_{ei} N_e
\end{aligned} \quad (2)$$

где J_i - потенциал ионизации с атомных уровней, ΔE_{ki} - разность энергий уровней k и i , H_{ea} , H_{ei} - скорости передачи энергии при упругих столкновениях электронов с атомами и ионами. При максвелловском распределении частиц по скоростям H_{ei} и H_{ea} описываются выражениями [6]

$$H_{ei} = \frac{e^4}{m_i} \cdot \left(\frac{8\pi m_e}{kT_e} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{(T_e - T_i)}{T_e} \cdot \ln \left(\frac{9(kT_e)^3}{8\pi N_e e^6} \right), \quad H_{ea} \cong \left(\frac{8kT_e}{m_e} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot (T_e - T_a) \cdot \sigma_{ea} \cdot \frac{4km_e}{m_a},$$

где σ_{ea} - сечение электронно-атомных столкновений, T_i и T_a - температура ионов и атомов, m_i , m_e и m_a - массы ионов, электронов и атомов, соответственно, k - постоянная Больцмана. Начальное условие для уравнения (3) следующее

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

где $\varepsilon_{el} = 0.35 \text{ eV}$ - начальная энергия электронов, получаемая как разность энергий ионизирующего фотона и потенциала ионизации с возбужденного $^3P_1$

состояния.

Лазерное излучение имело однородное распределение интенсивности в поперечном сечении луча и воздействовало на левую сторону газового объема, имеющего 3D цилиндрическую геометрию с диаметром D_0 и высотой H_0 . Интенсивность излучения I , формируемая в любой точке объема зависела от пространственных переменных $r(x, y, z)$, угловых переменных θ и φ , частотной переменной ν , и от времени t . Уравнение переноса и начальные условия можно записать в виде

$$\partial I / \partial \tau = \phi \cdot [S - I], \quad I(r(z = -H_0/2), \theta, \varphi, x, t) = \begin{cases} 0 & \text{при } \theta \neq 0 \\ I_L(x, t) & \text{при } \theta = 0 \end{cases}, \quad (3)$$

где ϕ профиль линии поглощения, имеющий доплеровскую зависимость от частоты $\phi = (1/\sqrt{\pi}) \exp(-x^2)$, $x = (\nu - \nu_0)/\Delta\nu_D$, ν_0 – центральная частота спектральной линии, и $\Delta\nu_D$ – доплеровская ширина линии.

В уравнении переноса S – функция источников: $S = 2h\nu_0^3/(c^2(n_1g_2/n_2g_1 - 1))$, где h – постоянная Планка, c – скорость света, g_1 и g_2 – статвеса уровней, $d\tau = \chi dr$ – бесконечно малое приращение оптической длины в направлении dr , χ – коэффициент поглощения:

$$\chi(r, t) = \chi_0(n_1(r, t) - (g_1/g_2)n_2(r, t)),$$

где $\chi_0 = (\lambda_0^3 N_0 / 8\pi) \cdot (g_2 / g_1) \cdot (A_{21} / \sqrt{\pi} \nu_{th})$. Оптическая толщина $\tau_0 = \chi_0 d_0$ определялась на частоте ν_0 вдоль диаметра цилиндра. Лазер накачки и зондирующий лазер имели одинаковую зависимость от частоты и времени следующего вида

$$I_L(\nu, t) = I_0^{\max} \cdot \frac{(\Delta\nu_L/2)^2}{(\nu - \nu_L)^2 + (\Delta\nu_L/2)^2} \cdot \frac{t}{\tau_p} \exp(1 - \frac{t}{\tau_p}), \quad (4)$$

где τ_p – параметр, определяющий время максимума лазерной интенсивности, для каждого из лазеров этот параметр мог отличаться; $I_0^{\max}$ максимальная интенсивность в центре линии ν_L ; $\Delta\nu_L$ – частотная ширина лазерного излучения имеющего лоренцовскую зависимость от частоты; ν_L лазерная частота, которая совпадала с ν_0 . В расчетной модели входная лазерная оптическая плотность

мощности J_0 ($J_0 = I_0^{\max} \pi \Delta \nu_L / 2$) задавалась в единицах $[Wcm^{-2}]$. Временная форма ионизирующего лазера имел тоже вид (4), а его частотная форма моделировалась дельта функцией.

Третий тестирующий лазер настраивался в центр линии $^2S_{1/2} \leftrightarrow ^2P_{1/2}$ ($\lambda_i = 493.41 nm$) иона бария и возбуждал резонансную флуоресценцию на этой длине волны. Граничные условия для него также соответствовали (3). Для иона бария использовалась двухуровневая квазистационарная модель. При максимальной степени ионизации $N_e / N_0 = 0.5$, для начальной концентрации атомов $N_0 = 6 \times 10^{11} cm^{-3}$ и температуре тигеля $\approx 1000K$ [7], оптическая толщина ионной линии по диаметру цилиндра составляет $\tau_i = 2.2$ и по высоте цилиндра высотой 10 см она равна 22. Поэтому для расчета флуоресценции в ионной линии $^2S_{1/2} \leftrightarrow ^2P_{1/2}$ необходимо решать уравнение переноса вида (3).

Алгоритм численного решения уравнения переноса на атомном ($\lambda_1 = 791nm$) и ионном ($\lambda_i = 493.41nm$.) переходах соответствовал работам [2-4]. Отличие от последней нашей постановки задачи состояло в структуре первичной ударно–радиационной модели, которая описывала кинетику фотоплазмы в двухступенчатом процессе. Далее представлены результаты численного моделирования.

Кинетика процесса формирования фотоплазмы показана на рис. 1 для $N_0 = 6.0 \times 10^{11} cm^{-3}$, $T = 1000K$, $D_0 = 1 cm$ и $H_0 = 10 cm$. Оптическая толщина по высоте цилиндра $\tau_{791} = 2$ ($\tau_{553,5} \approx 200$), $J_{01} = 10 Wcm^{-2}$ $J_{02} = 1.57 \times 10^3 Wcm^{-2}$. Отстройка второго лазера от первого равна нулю, $\tau_{p1} = \tau_{p2} = 10 \mu s$. На начальных временах воздействия $t \leq 3 \mu s$, происходит рост населенности возбужденного состояния $6s6p\ ^3P_1$. Одновременно атомы ионизируются вторым лазером и населенность, как основного так и возбужденного состояний падает при $t > 3 \mu s$, кривые 1,2. Но рост температуры электронов, вызванный сверхупругим нагревом, продолжается до времени $t \approx 5 \mu s$, после которого уже оказывается полностью исчерпан резервуар с возбужденными атомами. По мере роста

плотности электронов, температура электронов стабилизируется и ко времени $t \approx 50 \mu\text{s}$ выходит на величину $T_e \approx 0.35 \text{ eV}$. Однако далее температура электронов начинает плавно спадать и к концу процесса фотоионизации она уменьшается до величины $T_e \approx 0.25 \text{ eV}$. Это связано с потерей энергией электронов в возбуждающих столкновениях с атомами, которые с уменьшением интенсивностей лазеров начинают релаксировать в основное состояние, кривая 1. В основном происходит незначительное население возбужденного $^1P_0$ и метастабильных $^1D_2$, $^3D_{1,2,3}$ состояний, заселение которых сопровождается охлаждением электронов. Данные выводы подтверждены численными расчетами. Таким образом, при использованных в модели параметрах лазерных излучений ионизационный выход составляет $N_e / N_0 = 25 \%$.

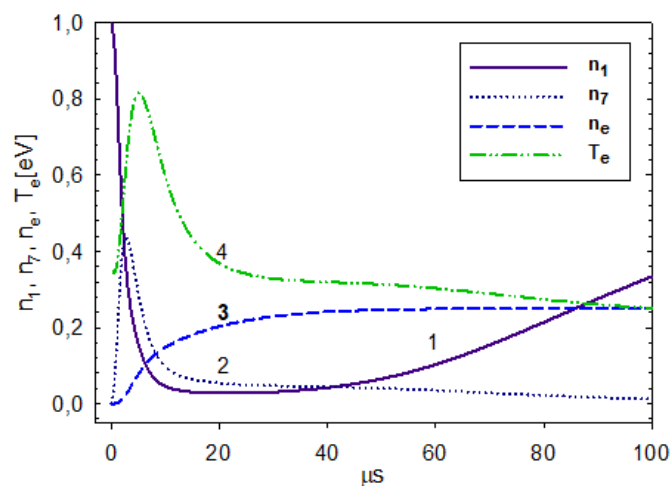


Рис.1. Кинетика бариевой фотоплазмы. Все величины усреднялись по объему среды.

Ионизационный выход рассчитывался по интенсивности излучения, рассеянного ионами бария по лучевому направлению, проходящему через середину высоты, в направлении перпендикулярном лазеру. Излучение тестирующего лазера воздействовало в центр резонансной линии иона бария на длине волны $\lambda_i = 493.41 \text{ nm}$. Концентрацию электронов дает концентрация ионов. Интенсивность флуоресценции рассчитывалась из уравнения переноса (4) с такими же граничными условиями, только для ионной линии бария. Кинетика

населенностей уровней иона бария была самосогласованна с кинетикой атомов. Кроме того, для исследования диапазона применения метода количественного спектрального анализа для оценки ионизационного выхода, интенсивность флуоресценции рассчитывалась в оптически тонком приближении.

На рис. 2а) показана интенсивность лазерно-индуцированной флуоресценции при воздействии тестирующего лазера в центр резонансной линии с $\lambda_i = 493.41 \text{ nm}$. Кривые 1-3 соответствуют различным интенсивностям ионизирующего лазера $J_{02} = 6.0 \times 10^2 \text{ W cm}^{-2}$; 1.57×10^3 ; 3.8×10^3 , при одинаковой плотности мощности лазера накачки $J_{01} = 10 \text{ W cm}^{-2}$. Такие параметры обеспечивают степень ионизации атомов в двухступенчатом процессе, соответственно $N_e / N_0 = 0.1; 0.25; 0.5$, при начальной концентрации атомов бария $N_0 = 6.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$. Параметры тестирующего лазера: $J_{0i} = 1.15 \times 10^3 \text{ W cm}^{-2}$; $\Delta\tau_i = 50 \text{ ns}$. В конце процесса ионизации достигаются следующие концентрации ионов $N_i = N_e = 0.6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}; 1.5 \times 10^{11}; 3.0 \times 10^{11}$. Эти значения соответствуют оптическим толщинам ионной линии; $\tau_0^i = 0.45; 1.1; 2.2$ вдоль диаметра основания цилиндра. Действие тестирующего лазера начиналось одновременно с двухступенчатым процессом. Но поскольку длительность probe laser была выбрана значительно больше длительности первых лазеров ($\tau_1 = \tau_2 = 10 \mu\text{s}$), то фотовозбуждение ионов реализовалось в квазистационарном режиме и интенсивность флуоресценции отражала кинетику фотоионизации атомов. Интенсивность флуоресценции была использована для расчета концентрации ионов в предположении оптически тонкого однородного слоя излучающих ионов бария. Для насыщения цилиндрического объема среды радиуса $R_0 = 0.5 \text{ cm}$ с высотой $h_0 = 10.0 \text{ cm}$ с концентрацией ионов N_0^i , лазерное излучение должно иметь оптическую плотность мощности порядка $J_{sat} = g_2 / (g_1 + g_2) N_0^i A_{21}^i h \nu_0^i h_0$, где g_1 и g_2 статистические веса основного и возбужденного уровня линии. Для ионной линии с $\lambda_{ion} = 493.41 \text{ nm}$, $g_1 = g_2 = 2$, $A_{21}^i = 0.955 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$, получим для J_{sat} значение $J_{sat} \approx 20 \times 10^{-11} N_0^i$. Интенсивность лазерно-индуцированной

флуоресценции однородной оптически тонкой плазмы можно рассчитать из соотношения $J_{fl} = J_{sat} / (4\pi)$. Если подставить в последнее соотношение выражение для J_{sat} , а затем выразить из полученной формулы N_0^i , определим концентрацию ионов в методе двух–ступенчатой ионизации по формуле $N_0^i(t) = (0.63 \times 10^{11}) J_{fl}, \text{ cm}^{-3}$.

На рис. 2б показана динамика концентрации ионов, полученная по лазерно-индуцированной флуоресценции рис. 2а), с использованием последней формулы, сплошные кривые. Пунктирные кривые дают концентрацию N_0^i восстановленную по результатам численного моделирования кинетики электронной плотности, которые играют роль истинных значений концентрации ионов. Кривые 1 соответствуют степени ионизации $N_e / N_0 = 0.1$; 2 – 0.25; 3 – 0.5.

Наибольшее значение погрешности определения концентрации ионов по лазерно-индуцированной флуоресценции для кривых 3 составляет 8%. Следовательно, метод лазерно-индуцированной флуоресценции линии на длине волны $\lambda_i = 493.41 \text{ nm}$ дает хорошие результаты и может применяться для решения практических задач количественного спектрального анализа при измерении ионизационного выхода ионов бария для получения ионного пучка и его последующей загрузки в магнито-оптическую ловушку.

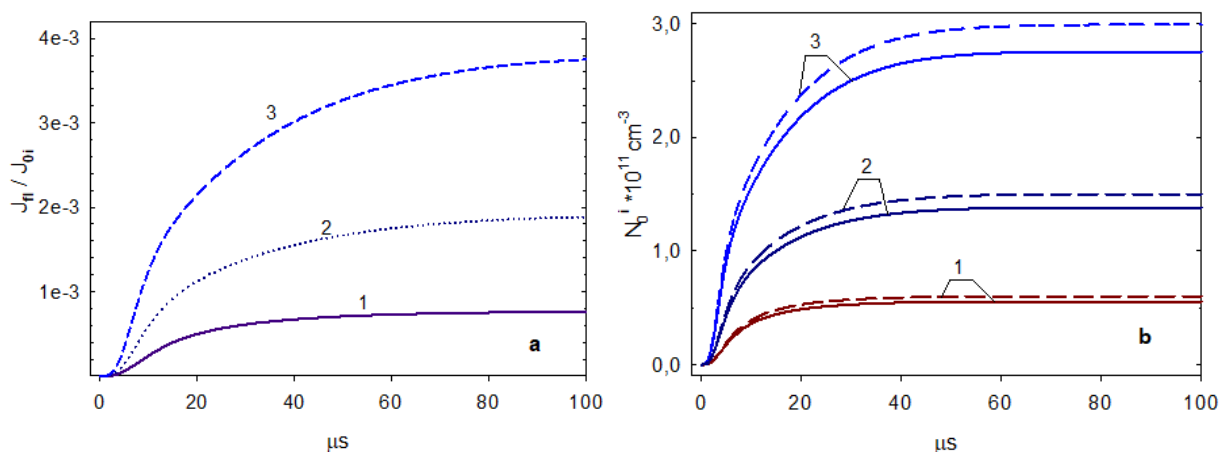


Рис.2. а) - Интенсивность флуоресценции ионной линии бария; б) – концентрация ионов при различной степени ионизации атомов.

В заключение отметим, что для реализуемых в экспериментах начальных концентрациях атомов бария и фото-ионизационном выходе $\leq 50\%$, как например в [6], погрешность определение концентрации ионов бария по интенсивности лазерно-индуцированной флуоресценции не превышает 8%. Следовательно, при измерении ионизационного выхода ионного бариевого пучка для его загрузки в МОЛ использование метода количественного спектрального анализа можно считать обоснованным. Перспектива повышение эффективности ионизации бария по двух-ступенчатой схеме, использующей возбужденный $6s6p\ ^3P_1$ уровень, в основном обязана увеличению мощности ионизирующего лазера, а не лазера накачки.

Список литературы

1. Steele A.V. Photoionization and photoelectric loading of barium ion traps / A.V. Steele, L.R. Churchill, P.F. Griffin, and M.S. Chapman // Phys. Rev. A. – 2005. – V.75.– #5. P.053404–1-053404–5.
2. Kosarev N.I. Laser plasma channel formation in barium vapor based on superelastic heating of electrons / N.I. Kosarev // J. Phys. B. – 2014. – V.47. P.245002-1–245002-9.
3. Kosarev N.I. Kinetics of photoplasma of dense barium vapour / N.I. Kosarev // Quantum Electron. – 2015. – V.45. – #3. P.228-234.
4. Kosarev N.I. Resonance fluorescence of laser-driven barium plasma / N.I. Kosarev // Appl. Opt. – 2021. – V.60. – #23, P.6850-6856.
5. Kaluar M.A. Absolute photoionization cross section from the $^{1,3}P_1$ excited states of barium / M.A. Kaluar, M Rafic, Sami-ul-Haq and M A Baig // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2007. – V.40. P.2307-2319.
6. Measures R.M. A theoretical model of laser ionization of alkali vapors-based on resonance saturation / R.M. Measures, P.G. Cardinal, G.W. Schinn // J. Appl. Phys. – 1981. – V.52. – #3. P.1269-1277.
7. Jana B. Measurement of photoionization yield in low-density barium photoplasma study / B. Jana, P.T. Kathar, A. Majumber, K.B. Thakur, and A.K. Das // Meas. Sci. and Thechnol.– 2014. – V.25. P.015003-1–015003-9.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТРЕХЧАСТИЧНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ УЛЬТРАХОЛОДНОЙ БАРИЕВОЙ ПЛАЗМЫ.

Н.И. Косарев

Сибирский федеральный университет,

Институт цветных металлов и материаловедения, *kosarev_nikolai@mail.ru*

В работе [1] получена ультрахолодная нейтральная плазма (УНП) с чрезвычайно низкими температурой электронов $T_e \approx 0.1 K$ и ионов $T_i \approx 10 \mu K$, при концентрации электронов $N_e \approx 2 \times 10^9 cm^{-3}$. Такая УНП была создана в двухступенчатом процессе при фотоионизацией метастабильных атомов ксенона излучениями лазеров с длинами волн $\lambda_1 = 882 nm$ и $\lambda_2 = 514 nm$. Метастабильные атомы ксенона получались в разряде, затем замедлялись по методике зеемановского замедления. После чего атомы собирались в магнито-оптической ловушке (МОЛ) и далее охлаждались лазерным излучением на переходе с длиной волны $882 nm$. Авторы [1] заявляют о создании метастабильных атомов с концентрацией $\approx 2 \times 10^{10} atoms / cm^3$. Частота фотоионизирующего лазера ($\lambda_2 = 514 nm$) могла перестраиваться так, что образовавшийся при этом фотоэлектрон имел температуру от $0.1 K$ и выше. Рекомбинация плазмы при таких температурах электронов происходит в трех-частичных процессах. Характерное время тройной рекомбинации есть $\tau_{rec} = 1/(N_e \beta_{rec})$, где коэффициент тройной рекомбинации (TBR) равен [2]

$$\beta_{rec} = 8,85 \cdot 10^{-27} \{T_e [eV]\}^{-9/2} N_e \quad (1)$$

В соответствии с формулой (1) время τ_{rec} должно быть порядка $\approx 10^{-15} s$. Однако в [1] утверждается, что наблюдаемое время рекомбинации составляло $100 \mu s$. Обсуждая результаты эксперимента [1], авторы [3,4] пришли к выводу, что на начальном этапе релаксации плазмы электроны набирают джоулеву энергию за счет коллективных взаимодействий. В результате чего время рекомбинации в соответствии с формулой (1) возрастает.

Цель представленной работы состоит в построение ударно-радиационной

модели кинетики формирования бариевой плазмы в двухступенчатом процессе и её рекомбинации. Задача описывается скоростными уравнениями баланса населенностей многоуровневого атома бария. Первый лазер накачки с $\lambda_1 = 553.5 \text{ nm}$ возбуждает верхнее состояние $^1P_1$ резонансной линии $6s^2 \ ^1S_0 \leftrightarrow 6s6p \ ^1P_1$, в которой учитывается перенос резонансного излучения ввиду её большой оптической толщины. Второй ионизирующий лазер с $\lambda_2 = 417.79 \text{ nm}$ ионизирует атомы из состояния $^1P_1$. Константа скорости трехчастичной рекомбинации входит в уравнения баланса и самосогласованна с температурой электронов. Такая система уравнений при учете 3D переноса излучения в цилиндрическом объеме среды имеет интегродифференциальную структуру и решается численными методами.

Для построения многоуровневой ударно-радиационной модели кинетики фотоплазмы в двухступенчатом процессе необходимо иметь сечение процесса фотоионизации с уровня $^1P_1$, соответствующее такой частоте лазерного излучения, при которой начальная энергия образованного фотона была бы равна $T_e = 8.6 \times 10^{-6} \text{ eV}$ (0.1K). Пороговая частота фотоионизации с уровня $^1P_1$ равна $\lambda_{th} = 417.8 \text{ nm}$. При начальной энергий фотоэлектрона равной $T_e = 8.6 \times 10^{-6} \text{ eV}$, ионизирующее лазерное излучение должно иметь длину волны $\lambda_2 = 417.79 \text{ nm}$. Величина сечения σ_i для фотоионизации с уровня $^1P_1$ атома бария по литературным данным для $\lambda_2 = 417.79 \text{ nm}$ составляет $\sigma_i = 1.2 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$.

Построена многоуровневая модель атома бария, которая состояла из десяти уровней [5-7], обозначенных в системе уравнений (2) цифрами от 1 до 10: 1— основной уровень $^1S_0$; 2 — возбужденный уровень $^1P_1$; уровни 3–6 — метастабильные состояния $^1D_2$ и $^3D_{1,2,3}$; возбужденные уровни 7–10 — $6s6p \ ^3P_1$, $5d6p \ ^1D_2$, $5d6p \ ^1P_1$, $6s7p \ ^1P_1$; ионизационное состояние. Скоростные уравнения ударно–радиационного баланса имели следующий вид:

$$\left. \begin{aligned}
dn_1/dt &= -B_{12}(\int \phi_\nu J_\nu d\nu)n_1 + B_{21}(\int \phi_\nu J_\nu d\nu)n_2 + \sum_{i=2,9,10} \Gamma_{i1}n_i + \sum_{i=1}^{10} (k_{i1}N_i - k_{1i}N_1)n_e + \beta_{rec}N_en_e \\
dn_2/dt &= B_{12}(\int \phi_\nu J_\nu d\nu)n_1 - B_{21}(\int \phi_\nu J_\nu d\nu)n_2 - \sum_{i=1,3,5} \Gamma_{2,i}n_i + \sum_{i=7}^{10} (k_{i7}N_i - k_{7i}N_7)n_e - \sigma_i F_2 n_2 \\
dn_3/dt &= \sum_{i=2,8,9,10} \Gamma_{i3}n_i + \sum_{i=3} (k_{i3}N_i - k_{3i}N_3)n_e, \quad dn_4/dt = \sum_{i=7,8} \Gamma_{i,4}n_i + \sum_{i=4} (k_{i4}N_i - k_{4i}N_4)n_e, \\
dn_5/dt &= \sum_{i=2,7} \Gamma_{i5}n_i + \sum_{i=5} (k_{i5}N_i - k_{5i}N_5)n_e, \quad dn_6/dt = \Gamma_{86}n_8 + \sum_{i=6} (k_{i6}N_i - k_{6i}N_6)n_e, \\
dn_m/dt &= \sum_{i>m} \Gamma_{im}n_i - \sum_{i<m} \Gamma_{mi}n_m + \sum_{j \neq m} (k_{jm}N_j - k_{mj}N_m)n_e, \\
(m=7, \dots, 10 \quad i=3,4, \dots, 10 \quad j=1,2, \dots, 10), \quad dn_e/dt &= \sigma_i F_2 n_2 - \beta_{rec}N_en_e.
\end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Первое уравнение системы (2) описывает кинетику плотности атомов $n_1 = N_1/N_0$ в основном состоянии под действием процессов: фотовозбуждения и фототушения со скоростями $B_{12}(\int \phi_\nu J_\nu d\nu)$ и $B_{21}(\int \phi_\nu J_\nu d\nu)$ соответственно, где B_{12} и B_{21} – коэффициенты Эйнштейна; Γ_{ij} коэффициенты Эйнштейна для спонтанного распада с верхних уровней i на уровень j , N_0 – начальная концентрация атомов. Интеграл $\int \phi_\nu J_\nu d\nu$ представляет собой интегральную по телесным углам и частоте интенсивности, формируемой под действием лазерного излучения и внутренних источников фотонов в среде, где $J_\nu = (1/4\pi) \oint_{\Omega} I d\omega$ есть трехкратный интеграл по пространственным переменным. k_{mi} и k_{im} коэффициенты возбуждения и девозбуждения уровней электронным ударом. Второе уравнение системы (2) описывает кинетику плотности атомов $n_2 = N_2/N_0$ на уровне 2 под действием процессов радиационного фотовозбуждения и фототушения лазерным излучением, электронного удара и ионизации лазерным излучением. Здесь F_2 поток фотонов лазерного излучения на длине волны $\lambda_2 = 417.79 \text{ nm}$, $\sigma_i = 1.2 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ – сечение фотоионизации с уровня $^1P_1$, при котором обеспечивается начальная температура электронов в $\varepsilon_{el} = 8.6 \times 10^{-6} \text{ eV}$.

Уравнения с третьего по шестое описывают кинетику одноименных метастабильных уровней. Седьмое уравнение состоит из четырех уравнений и описывает кинетику одноименных возбужденных уровней. Последнее уравнение системы (2) описывает кинетику плотности электронов $n_e = N_e/N_0$ под действием

процессов ионизации атомов лазерным излучением и трехчастичной рекомбинации с коэффициентом трехчастичной рекомбинации β_{rec} , определяемый по формуле (1), N_e концентрация электронов. Начальные условия для системы (2) при $t_0 = 0$ следующие

$$n_e(r, t_0) = 0, \quad n_1(r, t_0) = 1, \quad n_m(r, t_0) = 0, \quad m = 2, 3, \dots, 10.$$

Уравнения кинетики (2) дополнялись уравнениями для электронной температуры T_e [eV] следующего вида

$$dT_e/dt = \frac{2}{3} \sum_{i>k}^n (k_{ik} N_i - k_{ki} N_k) \Delta E_{ki} \quad (3)$$

где ΔE_{ki} разность энергий между уровнями k и i . Начальное условие для (3) следующее

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

где ε_{el} начальная энергия электронов.

Лазерное излучение имело однородное распределение интенсивности в поперечном сечении луча и воздействовало на левую сторону газового объема, имеющего 3D цилиндрическую геометрию с диаметром D_0 и высотой H_0 . Интенсивность I , в любой точке объема зависела от пространственных $r(x, y, z)$, угловых θ и φ , и частотной ν переменных, от времени t . Уравнение переноса и начальные условия следующие

$$\partial I / \partial \tau = \phi \cdot [S - I], \quad I(r(z = -H_0/2), \theta, \varphi, x, t) = \begin{cases} 0 & \text{при } \theta \neq 0 \\ I_L(x, t) & \text{при } \theta = 0 \end{cases}, \quad (4)$$

где ϕ профиль линии поглощения, имеющий доплеровскую зависимость от частоты $\phi = (1/\sqrt{\pi}) \exp(-x^2)$, $x = (\nu - \nu_0)/\Delta\nu_D$, ν_0 – центральная частота спектральной линии, $\Delta\nu_D$ – доплеровская ширина линии, S – функция источников: $S = 2h\nu_0^3/(c^2(n_1 g_2/n_2 g_1 - 1))$, где h – постоянная Планка, c – скорость света, g_1 и g_2 – статвеса уровней, $d\tau = \chi dr$ – приращение оптической длины в направлении dr , χ – коэффициент поглощения:

$$\chi(r,t) = \chi_0(n_1(r,t) - (g_1/g_2)n_2(r,t)),$$

где $\chi_0 = (\lambda_0^3 N_0 / 8\pi) \cdot (g_2 / g_1) \cdot (A_{21} / \sqrt{\pi} \nu_{th})$. Оптическая толщина $\tau_0 = \chi_0 d_0$ определялась на частоте ν_0 вдоль диаметра цилиндра. Лазер накачки имел следующую зависимость от частоты и времени

$$I_L(\nu, t) = I_0^{\max} \cdot \frac{(\Delta \nu_L / 2)^2}{(\nu - \nu_L)^2 + (\Delta \nu_L / 2)^2} \cdot \frac{t}{\tau_p} \exp(1 - \frac{t}{\tau_p}), \quad (5)$$

где τ_p – параметр, определяющий время максимума лазерной интенсивности, для каждого из лазеров этот параметр мог отличаться; $I_0^{\max}$ максимальная интенсивность в центре линии ν_L ; $\Delta \nu_L$ – частотная ширина лазерного излучения имеющего лоренцовскую зависимость от частоты; ν_L лазерная частота, которая совпадала с ν_0 . В расчетной модели входная лазерная оптическая плотность мощности J_0 ($J_0 = I_0^{\max} \pi \Delta \nu_L / 2$) и задавалась в единицах $[Wcm^{-2}]$. Временная форма ионизирующего лазера имел тоже вид (5), а его частотная форма моделировалась дельта функцией. Алгоритм численного решения уравнения переноса на атомном переходе соответствовал работам [5-7]. Далее представлены результаты численного моделирования.

Рис. 1 показывает результаты моделирования кинетики ионизации и рекомбинации атома бария: а) - усредненная по объему среды кинетика населенности основного состояния, кривая 1; возбужденного состояния, кривая 2; метастабильного $^3D_2$ уровня, кривая 3; кинетика электронной плотности, кривая 4 и температура электронов, кривая 5. Параметры модели следующие: $N_0 = 2.0 \times 10^{10} cm^{-3}$, начальная температура атомов $T_a = 1.78 \times 10^{-3} K$, диаметр цилиндра $D_0 = 1 cm$, высота $H_0 = 1 cm$. Оптическая толщина по диаметру цилиндра $\tau_{553,5} = 500$, интенсивность лазерного излучения в максимуме импульса для лазера накачки $J_{01} = 6.13 \times 10^2$, при его длительности $\tau_{p1} = 15$. Для ионизирующего лазера эти параметры, соответственно, $J_{02} = 2.2 \times 10^4 Wcm^{-2}$ и $\tau_{p2} = 20 ns$. Показана начальная стадия формирования фотоплазмы на временах $\leq 250 ns$. Прежде всего, следует отметить значительное заселение метастабилья

$^3D_2$, населенность которого достигает значения $n_4 = 0.18$. Населенность метастабильного состояния $^1D_2$ на рис.1 не показана, потому, что она значительно ниже населенности метастабилья $^3D_2$ ($n_3 = 0.026$). Это связано с соотношениями вероятностей распада на эти уровни через возбужденное $^1P_1$ состояние ($\Gamma_{25} > \Gamma_{23}$). Результаты расчетов показали, что населенность n_5 метастабильного уровня $^3D_2$ растет с ростом мощности лазера накачки и может достигать значения ≈ 0.8 . Данный факт свидетельствует о возможности значительно повысить эффективность ионизации, если частоту ионизирующего лазера настроить в континуум с метастабилья $^3D_2$. Данная схема двухступенчатой ионизации через метастабиль $^3D_2$ не страдает ограничениями по сравнению со схемой при участии резонансного $^1P_1$ уровня. Во-первых: некритичным является отстройка второго лазера от лазера накачки. Дело в том, что если эта отстройка будет превышать время заселения метастабилей $1/\Gamma_{25}$, эффективность ионизации снижается за счет обеднения уровня $^1P_1$ из-за спонтанного распада. Во-вторых: в схеме ионизации через $^3D_2$ метастабиль не является критичным мощность ионизирующего лазера, чего не скажешь в схеме, использующей $^1P_1$ уровень. В последнем случае эта мощность должна обеспечить вероятность ионизации не менее чем вероятность спонтанного распада Γ_{25} .

Рис. 1b) показывает кинетику рекомбинации плазмы на временах $\approx 800 \mu s$. Температура электронов продолжает расти почти линейно на всем расчетном промежутке времени, кривая 5. Это связано в основном с деактивацией метастабильных состояний $^1D_1$ (кривая 2) и $^3D_2$ (кривая 3), населенности которых плавно уменьшаются со временем. В отличие от метастабилей, населенность основного состояния медленно увеличивается, кривая 1. К концу расчетного промежутка времени $t \approx 1.0 \mu s$ температура электронов растет до величины $\approx 0.16 eV$. При такой её величине, время рекомбинации оцененной по формуле (1) для $N_e = 2.0 \times 10^9 cm^{-3}$, составит уже величину $\approx 7 \times 10^4 s$. Поэтому рекомбинации плазмы на временах $t \approx 1.0 \mu s$ практически не наблюдается

совсем, кривая 4.

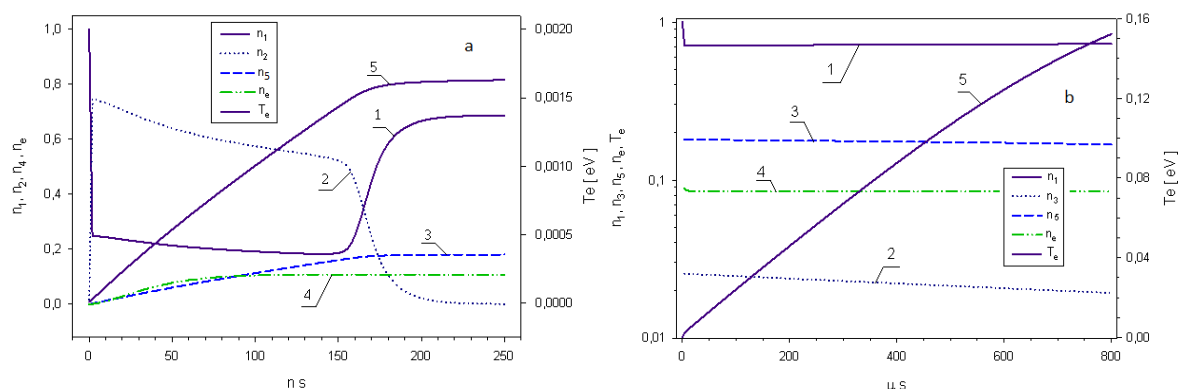


Рис. 1. Кинетика ионизации и рекомбинации на временах (a) $t \leq 250 \text{ ns}$ и (b) $t \leq 800 \mu\text{s}$.

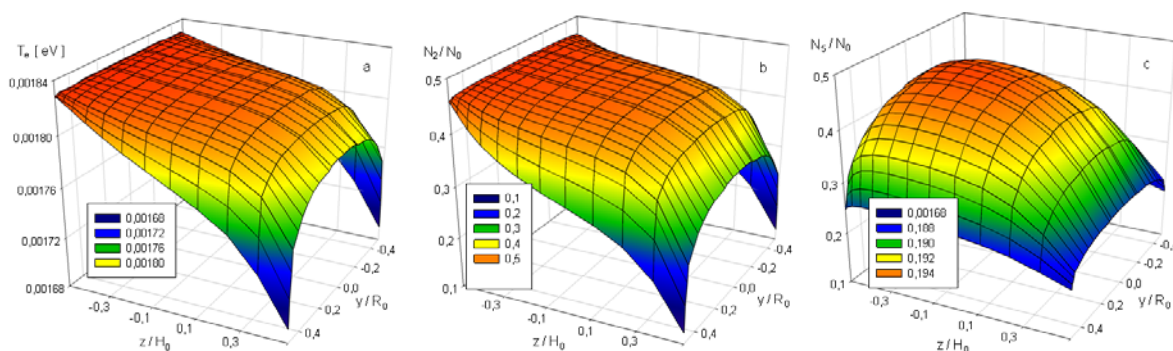


Рис.2. Пространственное распределение (a) электронной температуры, (b) населенность $^1P_1$ уровня и (c) метастабилья $^3D_2$ при $t = 200 \text{ ns}$.

Таким образом, при воздействии на пары бария лазерными излучениями по двухступенчатой схеме происходит заселение метастабилей $^1D_1$ и $^3D_2$ через спонтанный распад возбужденного $^1P_1$ уровня. Электроны, образованные при низкой начальной температуре сначала набирают джоулеву энергию в сверхупругих столкновениях за время действия лазера накачки и лазера ионизации. Далее электроны продолжают нагреваться уже деактивируя эти метастабильные состояния. Поэтому процесс трехчастичной рекомбинации плазмы значительно замедляется. Рис. 2 демонстрирует результаты 3D моделирования пространственного распределения по объему среды (a) электронной температуры, (b) плотности атомов в состоянии $^1P_1$, (c) плотность

атомов на метастабильном $^3D_2$. Момент времени $t = 200\text{ ns}$ соответствует начальному этапу ионизации, когда действие импульсов ионизации и накачки уже прекратилось и электроны набрали энергию через сверхупругий удар. Распределение электронной температуры по радиальной координате в целом достаточно сильно отражает пространственное распределение населенности возбужденного состояния $^1P_1$. Похожее на пространственное распределение n_2 демонстрирует и распределение по объему среды населенности метастабильного $^3D_2$ (с). Из-за большой оптической толщины среды на резонансном переходе, поглощение лазера накачки приводит к неоднородному по высоте цилиндра фотовозбуждению уровня $^1P_1$, поверхность (b). У боковой поверхности цилиндра выход излучения из плазмы приводит к распаду населенности возбужденного уровня и все поверхности рис.2 загибаются вниз. Особенно этот загиб проявляется на теневой границе среды. Внутри среды выход фотонов наружу чрезвычайно маловероятен. Фотоны находятся в плененном состоянии из-за резонансного поглощения излучения. Поэтому внутри цилиндрической среды состояние уровня $^1P_1$ сильнее к условию насыщения, поверхность (b). Следовательно, здесь и сверхупругий нагрев электронов идет более эффективно, поверхность (a). Таким образом, неоднородность пространственного распределения электронной температуры и плотности возбужденного состояния уровней 2 и 5 связана с переносом излучения в 3D цилиндрическом объеме. Это и демонстрируют поверхности рис.2.

Результаты численных экспериментов показали, что для ультрахолодной бариевой плазмы джоулев нагрев электронов осуществляется в два этапа. На первом этапе воздействия лазера накачки и ионизирующего лазера происходят сверхупругие тушащие столкновениями электронов с атомами в возбужденном состоянии $^1P_1$. При этом температура электронов растет почти в 200 раз и время трехчастичной рекомбинации плазмы составляет $\approx 100\text{ }\mu\text{s}$. Одновременно с двухступенчатой ионизацией идет заселение метастабильных $^1D_1$ и $^3D_2$ состояний за счет спонтанного распада $^1P_1$ уровня. Вероятность их заселения тем

больше, чем выше интенсивность лазера накачки. Вторым этапом джоулевого нагрева электронов в бариевой плазме реализуется при последующей медленной дезактивации метастабильных состояний. Температура электронов продолжает расти, что приводит к значительному замедлению времени рекомбинации плазмы ($\tau_{rec} > 10^5 \text{ s}$). Следовательно, результаты, полученные методом численного моделирования являются косвенным подтверждением гипотезы о замедлении трехчастичной рекомбинации плазмы ксенона именно благодаря сверхупругому нагреву электронов при дезактивации $6p[5/2]_3$ состояния.

Список литературы

1. Killian T.S. Creation of an Ultracold Neutral Plasma / T.S. Killian, S. Kulin, S.D. Bergeson, S.D. Orozco, S.L. Rolston // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – V.83. P.4776-4779.
2. Raiser Yu.R. Gas Discharge Physics / Yu.R. Raiser. - Springer, Berlin, 1997. - 449 p.
3. Tkachev A.N. Moderation of recombination in an ultracold laser-produced plasma / A.N. Tkachev, S.I. Yakovlenko // *Quantum electronic* – 2000. – V.30. - #12. P.1077-1079.
4. Isaev I.L. Interaction of ultracold non-ideal ion-electron plasma with a uniform magnetic field / I.L. Isaev I.L., A.P. Gavriluk // *J. of Phys. B: At. Molec. and Opt. Phys.* – 2018. – V.51. - #2. P.025701–1-025701–6.
5. Kosarev N.I. Laser plasma channel formation in barium vapor based on superelastic heating of electrons / N.I. Kosarev // *J. Phys. B.* – 2014. – V.47. P.245002-1–245002-9.
6. Kosarev N.I. Kinetics of photoplasma of dense barium vapour / N.I. Kosarev // *Quantum Electron.* – 2015. – V.45. – #3. P.228-234.
7. Kosarev N.I. Resonance fluorescence of laser-driven barium plasma / N.I. Kosarev // *Appl. Opt.* – 2021. – V.60. – #23, P.6850-6856.

ЗАВИСИМОСТЬ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОЖИДАНИЯ ПОРЯДКОВЫХ СТАТИСТИК ОТ ОБЪЁМА ВЫБОРКИ НА ПРИМЕРЕ РАЗМАХА

Н.П.Кузенков¹

¹Сибирский федеральный университет,
Институт космических и информационных технологий, каф. прикладной
математики и компьютерной безопасности, *knp@vivaldi.net*

Порядковые статистики часто встречаются теоретической и практической статистике. Теория порядковых статистик имеет дело с упорядоченными случайными величинами занимающими определённые места в упорядоченной выборке.

Использование порядковых статистик можно найти в решении разнообразных задач науки и техники, например, порядковые статистики могут быть использованы при решении локационных задач и разделения зашумлённого сигнала и шума, в задачах идентификации речевых сигналов, прогнозировании объёмов продаж и финансовых рядов, а также экстремальных значений в различных природных и технических системах, в том числе, чрезвычайных ситуаций [1-5].

Одной из основополагающих работ по порядковым статистикам является регулярно переиздаваемая монография, Э. Гумбеля, впервые опубликованная в середине прошлого века [6], систематизирующая предыдущие публикации, берущие своё начало ещё в двадцатых годах. Таким образом, несмотря на отсутствие целенаправленного изучения порядковых статистик во многих ВУЗах, данная теория достаточно глубоко изучена и детально описана.

Если упорядочить случайные величины $X_1, X_2, \dots, X_n$ в порядке возрастания значений $X_1 \leq X_2 \leq \dots \leq X_n$, то X_i будет называться i -й порядковой статистикой. Порядковые статистики рассматривают свойства таких упорядоченных случайных величин, а также функций от них. Примерами порядковых статистик, прежде всего, служат такие экстремальные значения X_1 и X_n , как максимальное отклонение от выборочного среднего $X_n - \bar{X}$, а также размах выборки $R = X_n - X_1$.

Размах случайной величины иногда используется при решении статистических задач и отличается от множества прочих параметров описательной статистики, таких, как мода, медиана и моменты различных порядков своей способностью к увеличению значений по мере увеличения объёма выборки. Для нормальной генеральной совокупности среднее значение и среднеквадратичное отклонение размаха пропорциональны среднему квадратичному отклонению генеральной совокупности, при этом коэффициенты пропорциональности зависят от объёма выборки. Зная функции распределения случайной величины, можно определить функцию плотности распределения размаха следующим образом [7]:

$$f_R(\omega) = n(n-1) \int_{-\infty}^{\infty} (F(x+\omega) - F(x))^{n-2} f(x) f(x+\omega) dx \quad (1).$$

Согласно общей теории порядковых статистик, экстремальные порядковые статистики вида $\min(X_1, X_2, \dots, X_n)$ и $\max(X_1, X_2, \dots, X_n)$, имеют один из трёх видов распределения: Гумбеля, Фишера-Типпета или Вейбулла, также известных как обобщённое распределение экстремальных значений или же распределение экстремальных значений I, II и III типов [8,9]:

$$\begin{aligned} F_I(x) &= \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ e^{-x^\alpha}, & x > 0 \end{cases} \quad \alpha > 0 \\ F_{II}(x) &= \begin{cases} e^{-(x)^{-\alpha}}, & x \leq 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases} \quad \alpha > 0 \\ F_{III}(x) &= e^{-e^{-x}}, \quad x \in \mathbb{R} \end{aligned} \quad (2).$$

Целью данной работы является установление характера закономерностей изменения математического ожидания размаха от объёма выборки n для различных функций распределения вероятностей. Очевидно, что аналитическое определение зависимости такого рода с использованием формулы (1) сопряжено с серьёзными трудностями. По этой причине использовался вычислительный эксперимент, который заключался в генерации последовательностей случайных величин различной длительности и определении размаха случайной величины в зависимости от n .

Процедура вычислительного эксперимента выполнялась в следующем

порядке: генерировались случайные выборки, распределённые по одному закону, в различном объёме, который изменялся по экспоненте в пределах от 10 до 9506048 элементов, выборка каждого объёма генерировалась 1000 раз. Значения размаха, полученные в выборках одного размера, в дальнейшем усреднялись. Для генерации всех выборок использовался генератор типа «вихрь Марсена», имеющий период около 2^{19937} , кроме того, при переходе к новому закону распределения случайной величины, менялось зерно генератора случайных чисел, в качестве которого бралось текущее значение времени.

Полученные таким образом усреднённые значения размаха показали разнообразное поведение в зависимости от объёма выборки n . Для повышения удобства работы и улучшения визуализации вместо объёма выборки n использовалась величина $\ln(n)$ (Рис.1).

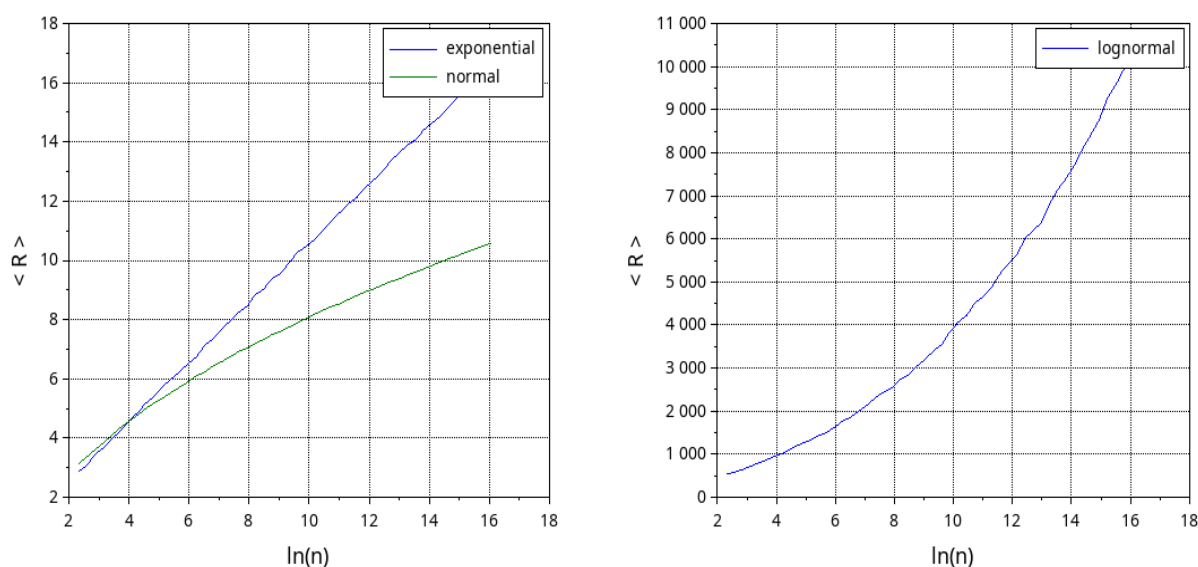


Рис. 1. Зависимость размаха от логарифма объёма выборки для экспоненциального, нормального и логнормального распределений случайной величины.

Помимо размаха, также оценивалась зависимость среднего квадратичного отклонения от объёма выборки. Данный показатель ожидаемо стабилизировался по мере роста объёма выборки, но в зависимости от типа распределения случайной величины, время достижения стационарных значений изменялось.

Как правило, данное значение переставало испытывать сколь-либо значимых изменений (более 0,001 стационарного значения) при достижении выборкой объёмов порядка 1000-3000 значений для всех рассмотренных типов распределений.

С целью унифицированного описания закономерностей роста размаха, была использована степенная зависимость следующего вида:

$$R(\phi) = p_1 + p_2 |p_3 + \phi|^k, \quad \phi = \ln(n) \quad (3).$$

Определение параметров $p_1 \dots p_3$ и k осуществлялось с помощью минимизации суммы квадратов разностей между модельной кривой (3) и экспериментальным графиком значений размахов по методу Нелдера-Мида. Наибольший интерес здесь представляет показатель степени k , максимально отражающий характер поведения кривой, параметры $p_1 \dots p_3$ носят вспомогательный характер и предназначены минимизировать ошибку оптимизации. Сумма $p_3 + \phi$ вычисляется по модулю с целью избежать трудностей в обработке комплексных чисел в случаях, когда её значение становится меньше нуля в процессе оптимизации. На конечный результат оптимизации использование модуля суммы не оказывает влияния. Характерно, что при выборе различных начальных точек, иногда возможно получение различных значений параметров после окончания процедуры оптимизации. Однако, разница значений в этом случае полученных значений параметра k обычно не превышает 1%, в то время, как значение других параметров могут различаться на порядок.

В процессе анализа графиков размаха, было замечено изменение их характера поведения в зависимости от формы графиков исходных функций распределения плотности вероятностей. Для контроля данной зависимости также были вычислены коэффициенты асимметрии A для всех исследуемых типов распределений случайной величины. В целом анализу подвергались по нескольку реализаций следующих видов распределений: хи-квадрат, экспоненциальное, логнормальное, нормальное (Табл.1).

В данной таблице представлены полученные значения показателя степени

и коэффициента асимметрии и описаны параметры распределений. Для логнормального распределения приводятся параметры нормального распределения, которые использовались для генерации случайной величины, подставляемую затем в экспоненциальную функцию.

Таблица 1. показатели степени и коэффициента асимметрии.

Вид распределения	Параметр распределения	k	A
Хи-квадрат	Количество степеней свободы: 1	1,044	2,788
	Количество степеней свободы: 2	0,988	1,969
	Количество степеней свободы: 3	0,929	1,638
	Количество степеней свободы: 4	0,862	1,393
	Количество степеней свободы: 5	0,811	1,300
	Количество степеней свободы: 6	0,778	1,115
Экспоненциальное	Математическое ожидание: 1,0	0,985	1,946
	Математическое ожидание: 3,0	1,001	1,982
	Математическое ожидание: 8,0	0,990	2,019
	Математическое ожидание: 15,0	1,001	2,000
	Математическое ожидание: 30,0	1,001	2,002
	Математическое ожидание: 50,0	1,003	2,012
Логнормальное	Среднее: 5,0, среднеквадратичное: 0,2	0,810	0,610

	Среднее: 5,0, среднеквадратичное: 0,3	0,970	0,934
	Среднее: 5,0, среднеквадратичное: 0,4	1,159	1,325
	Среднее: 5,0, среднеквадратичное: 0,5	1,667	1,721
	Среднее: 5,0, среднеквадратичное: 0,6	1,861	2,384
	Среднее: 5,0, среднеквадратичное: 0,7	2,172	2,682
	Среднее: 5,0, среднеквадратичное: 0,8	2,683	3,300
Нормальное	Среднеквадратичное: 1,0	0,508	0,008
	Среднеквадратичное: 3,0	0,535	0,003
	Среднеквадратичное: 8,0	0,557	-0,005
	Среднеквадратичное: 15,0	0,500	0,004
	Среднеквадратичное: 30,0	0,462	-0,022
	Среднеквадратичное: 50,0	0,391	-0,003

На основании полученных значений был построен график зависимости коэффициента асимметрии от показателя степени $A(k)$ (Рис.2). Как видно из рисунка, в целом существует положительная корреляция между коэффициентом асимметрии и показателем степени графика зависимости размаха от логарифма объема выборки. Исходя из такой зависимости можно ожидать тенденцию

увеличения значений показателя степени по мере утяжеления правого хвоста функции распределения плотности вероятностей анализируемой случайной величины. Кроме того, представленные точки образуют компактные группы, либо узкие линии, что даёт основания полагать на возможность определения в ряде случаев вида функции распределения случайной величины с помощью совместного использования значений показателя степени и коэффициента асимметрии.

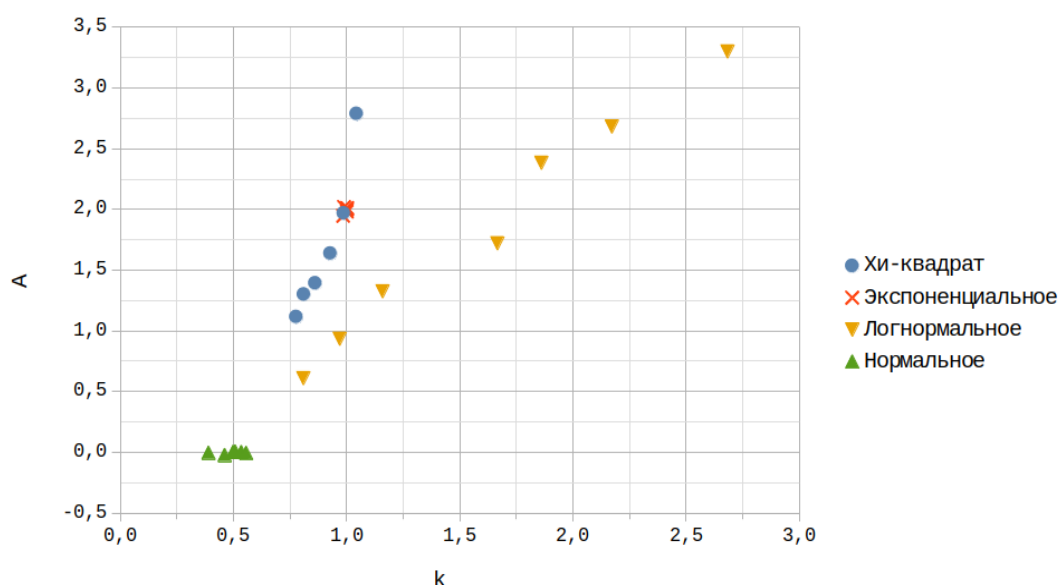


Рис. 2. Зависимость коэффициента асимметрии от показателя степени.

Данный подход к анализу случайных величин может быть использован в исследовании закономерностей экстремальных значений различных процессов, определении распределений случайных величин, а также с целью наглядного представления различающихся свойств функций распределения случайных величин.

Список литературы

1. Рудько И.М. Обнаружение подвижного объекта с использованием порядковых статистик / И.М. Рудько // Вестник томского государственного университета. Управление, вычислительная техника и информатика. — 2019. — № 48. С.42

– 50.

2. Рудько И.М. Применение порядковых статистик в задачах обнаружения в частотной области / И.М. Рудько // Управление большими системами: сборник трудов. — 2016. — № 62. С.6 – 29.
3. Васильев А.А. Гибридные модели прогнозирования объема продаж нового товара с использованием оценок на основе порядковых статистик / А.А. Васильев // Современные научные исследования и инновации. — 2014. — № 8-2(40). С.75 – 85.
4. Мисюра В.В. Прогнозирование тенденций развития случайных процессов с применением порядковых статистик / В.В. Мисюра // Инженерный вестник дона. — 2018. — № 4(51). С.115.
5. Акимов В.А. Введение в статистику экстремальных значений и ее приложения / В.А. Акимов, А.А. Быков, Е.Ю. Щетинин. Издательство: Всероссийский научно-исследовательский институт по проблемам гражданской обороны и чрезвычайных ситуаций МЧС России, 2009 — 536 С.
6. Gumbel E.J. Statistics of Extremes / E.J.Gumbel. — Courier Corporation, USA, 2012. — 400 p.
7. Корн Г. Справочник по математике для научных работников и инженеров / Г.Корн, Т.Корн — Лань, СПб, 2003. — 832 p.
8. Coles S. An Introduction to Statistical Modeling of Extreme Values / S.Coles. — Springer Science & Business Media, USA, 2001. — 208 p.
9. Laurens de Haan Extreme Value Theory: An Introduction / Laurens de Haan, Ana Ferreira — Springer Science & Business Media, USA, 2006. — 418 p.

АЛГОРИТМЫ ВЫЯВЛЕНИЕ СКРЫТЫХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ В ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫХ РЯДАХ ДАННЫХ ГЕОМОНИТОРИНГА

А.Н.Мацулев¹, А.Г.Зотин², К.В.Симонов¹, А.А. Кабанов³

¹³Институт вычислительного моделирования СО РАН. *simonovkv50@gmail.com*

²Сибирский государственный университет науки и технологий

имени академика М.Ф. Решетнева. *zotin@sibsau.ru*

³НП «ЭЦ Рационального освоения природных ресурсов». *weller86@inbox.ru*

Введение

Исследование посвящено выявлению и анализу триггерных механизмов возникновения сильных землетрясений в системе Земля-Луна. В рамках исследования проводится сопоставление последовательности сильнейших землетрясений с магнитудой ≥ 7 , начиная с 1911 года, и приливные компоненты. Используются каталог данных и приливные компоненты, которые анализировались с помощью сингулярного спектрального анализа (SSA – Singular Spectrum Analysis). При использовании данного метода ставилась задача выделить отдельные аддитивные составляющие исходного ряда. Притяжение Луны и Солнца на берегу океана вызывает циклические изменения в местном уровне моря [1]. Менее известно, что Земля также реагирует на лунно-солнечное гравитационное притяжение. Твердый прилив нередко достигает ± 20 см, и может превышать 30 см. В то время как океанские приливы можно легко измерить по отношению к уровню воды вблизи берега, твердые приливы исследуются при помощи спутниковых систем или чувствительных гравиметров. Сильные землетрясения являются экстремальным проявлением жизни сложной тектонофизической системы, которая долгое время «созревает» под действием многочисленных факторов, приходя на конечном этапе к катастрофе. Внешними триггерами землетрясений могут быть как детерминированные процессы, например движения небесных тел, так и другие физические факторы, имеющие стохастическую природу [2 – 4]. Для анализа землетрясений и сопоставления их

с внешними факторами рассмотрен каталог землетрясений с магнитудой ≥ 7 , начиная с 1911 года. Данные получены с помощью портала The Significant Earthquake Database [5]. Полученный каталог данных анализировался с помощью сингулярного спектрального анализа [6 – 7]. При использовании данного метода ставилась задача выделить отдельные аддитивные составляющие исходного ряда, такие как тренд (гладкая и медленно меняющаяся часть ряда), различные колебательные и периодические компоненты, а также шумовую компоненту.

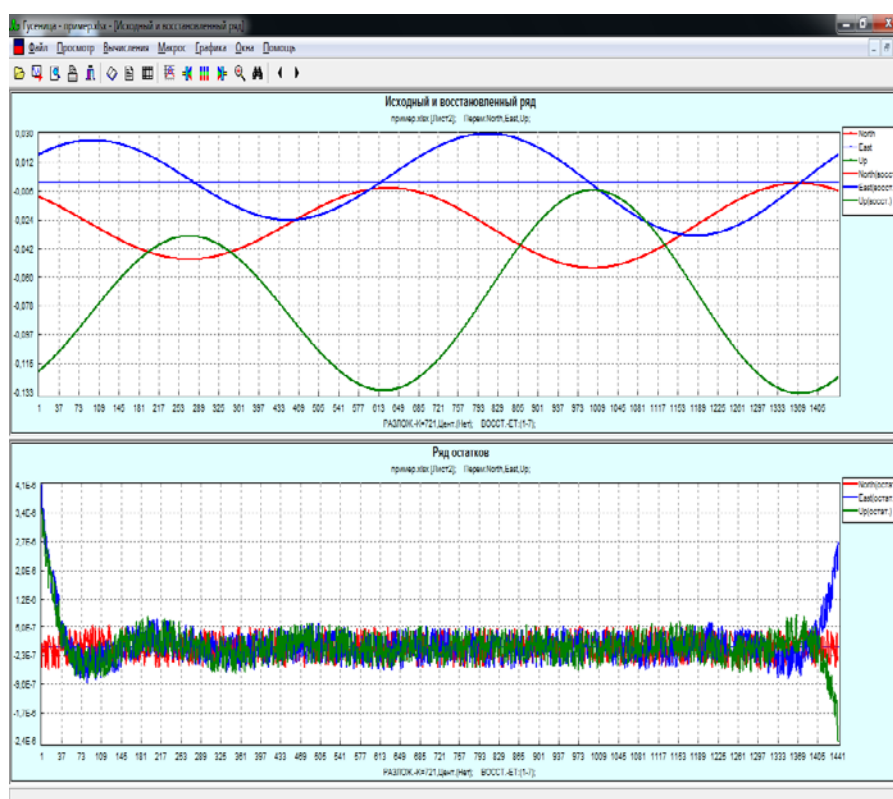


Рис. 1. Исходные и восстановленные ряды; также показан ряд остатков.

1. Метод сингулярного спектрального анализа

В работе применен метод сингулярного спектрального анализа (ССА «Гусеница») [6–7], который основан на анализе главных компонент и позволяет исследовать стационарные и нестационарные временные ряды. Ранее связь между классическими методами анализа стационарных временных рядов и методом главных компонент исследована в [8]. Ряд примеров использования ССА «Гусеница» приведен в [9]. В работах [10–12] этот метод использован для анализа и прогноза данных о солнечной активности, данных о неравномерности вращения Земли, а также для оценки изменчивости озона в атмосфере. Для

одномерного ряда базовый метод SSA [6–7] включает выполнение: преобразования исходного ряда в многомерное представление; сингулярного разложения получившейся траекторной матрицы; группировке членов разложения и последующем восстановлении. При этом часто оказывается возможным выделить отдельные аддитивные составляющие исходного ряда, такие как тренд (гладкая и медленно меняющаяся часть ряда), различные колебательные и периодические компоненты, а также шумовую компоненту. Способ преобразования одномерного ряда в многомерный представляет собой свертку временного ряда в матрицу, содержащую фрагменты временного ряда, полученные с некоторым сдвигом. Общий вид сдвиговой процедуры напоминает гусеницу, поэтому сам метод нередко так и называют – «Гусеница».

2. Анализ расчетных данных с помощью программы «Гусеница»

Одним из вычислительных инструментов анализа влияния движения небесных тел на твердую оболочку Земли, является программа Solid Earth Tide [13]. Используя данную программу, может быть получен расчет трехмерных координат смещения твердой поверхности Земли в зависимости от времени и географических координат наблюдателя. Оригинальная версия программы способна предоставить информацию о «твердых приливах» только до июня 2015 года, однако осенью 2015 г. появилась её модифицированная версия.

Это специализированный пакет Solid Earth Tide Computation, написанный Jose Gama под язык программирования и систему статистических вычислений «R» [14]. Для того, чтобы получить вектор смещений выбранной точки, необходимо сначала подключить пакет, а затем ввести и выполнить команду «CalculateTide (название, год, месяц, день, широта, долгота, булева переменная (TRUE = представить данные в виде матрицы))». В результате исполнения программы, на экран выводятся координаты смещения точки с минутным интервалом. Трехмерные данные, полученные с помощью пакета можно графически представить с помощью программы Гусеница (рис. 1), где по оси X – время, по Y – смещение, где красная кривая – это направление Север – Юг, синее Восток – Запад и зеленое Вверх-Вниз.

3. Моделирование данных геомониторинга с помощью программы «Гусеница»

В качестве примера анализа землетрясений и сопоставления их с внешними факторами был рассмотрен каталог землетрясений с магнитудой ≥ 7 , начиная с 1911 года по настоящее время. Данные были получены с помощью web-интерфейса на портале США [5]. Полученный каталог данных анализировался с помощью сингулярного спектрального анализа. Гусеница позволяет выделить отдельные составляющие исходного ряда, такие как тренд (гладкая и медленно меняющаяся часть ряда), различные колебательные и периодические компоненты, а также шумовую компоненту. Используя инструмент «Прогноз» программы Гусеница возможно визуализировать обнаруженные низкопериодические процессы во временном ряду как это представлено на рис. 2.

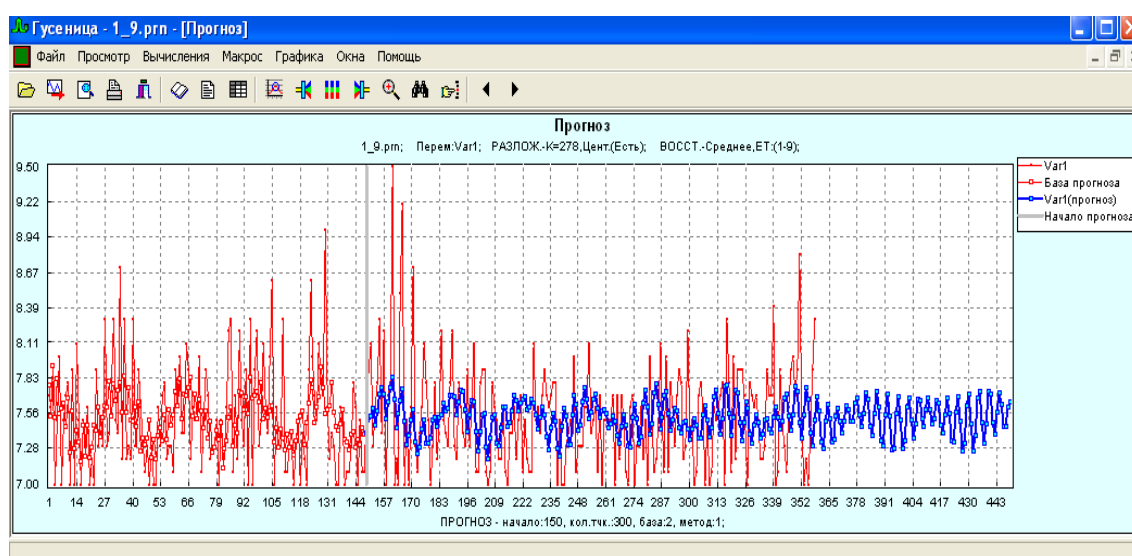


Рис. 2. Пример применения в программе «Гусеница» процедуры «Прогноз» к данным по магнитудам землетрясений ($M > 7$) из каталога [5] за период времени с 1911 по 2016 гг.

На рис. 2 показан результат работы программы «Гусеница» с каталогом сильнейших землетрясений. Исследуемый ряд составляют магнитуды последовательных землетрясений (порядковая нумерация). Поскольку шкала времени представлена неявно, то фактически анализируется форма огибающей

ряда магнитуд, что позволяет получать своеобразную «геометрическую» характеристику ряда. На такого рода информации основывается известная методика «энергетический прогностический клин», которая предложена и развивается в работах Сибгатулиным В.Г. [15].

Заключение

В качестве источников данных и программных средств для задач исследования закономерностей и поиска предвестников сильных землетрясений решено было использовать: данные о сильнейших землетрясениях с сайта NCEI; специализированный пакет Solid Earth Tide Computation, написанный JoseGama под язык программирования и систему статистических вычислений «R», который позволяет получить необходимую информацию о «твердых» приливах в земной коре; метод «Гусеница», который применяется для выявления низкочастотных трендов и поиска предвестников сильных землетрясений.

Представлены результаты работы программы «Гусеница» с каталогом сильнейших землетрясений, где приведены магнитуды последовательных землетрясений (порядковая нумерация), поскольку шкала времени фактически игнорируется, что дает возможность анализировать форму огибающей ряда магнитуд, и позволяет получать информацию подобную известному методу «энергетический прогностический клин». Выделение закономерностей в данных о предвестниках землетрясений является актуальной задачей, поскольку до сих пор ни один предложенный метод не может с высокой точностью определить время, место и силу землетрясений.

Список литературы

1. Мельхиор П. Земные приливы / П.Мельхиор. — М.: Мир. — 1968. — 482 с.
2. Tanaka S. Evidence for tidal triggering of earthquakes as revealed from statistical analysis of global data / S.Tanaka, M.Ohtake, H.Sato // J. Geophysical research. — 2002. — V.107. — № B10, 2211. — P. 1 – 11.
3. Métivier L. Evidence of earthquake triggering by the solid earth tides / L.Métivier, O.de Viron, C.P.Conrad, S.Renault, M.Diament, G.Patau // Earth and Planetary Science Letters. — 2009. — V.278. — I.3-4. — P. 370 – 375.

4. Салтыков В.А. Механизм приливных эффектов в сейсмичности на основе модели амплитудно-зависимой диссипации / В.А.Салтыков // Физическая мезомеханика. — 2014. — Т.17. — №5. — С.103 – 110.
5. The Significant Earthquake Database, [Электронный ресурс]. – Режим доступа: URL: <http://www.ngdc.noaa.gov/nndc/struts/form?t=101650&s=1&d=1>
6. Главные компоненты временных рядов: метод «Гусеница» / Под ред. Д.Л. Данилова и А.А. Жиглявского. — СПб.: Пресском. — 1997. — 308 с.
7. Голяндина Н.Э. Метод «Гусеница» SSA: анализ временных рядов / Н.Э.Голяндина. — СПб.: СПб унт. — 2004. — 74 с.
8. Бриллинджер Л. Временные ряды. Обработка данных и теория / Л.Бриллинджер. — М.: Мир. — 1980. — 536 с.
9. <http://www.gistatgroup.com>
10. Loskutov A. Testing and Forecasting the Time Series of the Solar Activity by Singular Spectrum Analysis / A.Loskutov, I.A.Istomin, K.M.Kuzanyan, O.L.Kotlyarov // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. — 2001. — V.4. — №1. — P.47 – 51.
11. Кашкин В.Б. Исследование неравномерности вращения Земли с помощью сингулярного спектрального анализа / В.Б.Кашкин, А.А.Баскова // Вестник Красноярского государственного университета. Физ.мат. науки. — 2006. — №7. — С.53 – 60.
12. Кашкин В.Б. Применение сингулярного спектрального анализа для выделения слабо выраженных трендов / В.Б.Кашкин, Т.В.Рублева // Известия Томского политехнического университета. — 2007. — Т.311. — №5. — С.116 – 119.
13. Dennis Milbert SOLID EARTH TIDE. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: URL: <http://home.comcast.net/~dmilbert/softs/solid.htm>
14. Solid Earth Tide Computation, [Электронный ресурс]. Режим доступа: URL: <https://cran.r-project.org/web/packages/solidearthtide/index.html>
15. Sibgatulin V.G. Resonances of gravitational tides and their effect on geological environment / V.G.Sibgatulin, S.A. Peretokin, A.A.Kabanov // Earth science frontiers. — 2014. — V.21(4). — P.303 – 310.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ
КИНЕТИЧЕСКОГО ИНДЕКСА В МОДЕЛИ КВАЗИОДНОМЕРНОГО
ИЗИНГОВСКОГО АНТИФЕРРОНАНОМАГНЕТИКА
С ФИКСИРОВАННЫМИ ПРИМЕСЯМИ**

Д.В. Спирин¹, В.Н. Удодов², Р.А. Козлитин³

ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет им. Н.Ф.
Катанова»,

Инженерно-технологический институт, ¹каф. цифровых технологий и
дизайна, ***dvspirin@mail.ru***, ²каф. промышленного, гражданского строительства и
техносферной безопасности, ***udodov@khsu.ru***, ³каф. программного обеспечения
вычислительной техники и автоматизированных систем, ***kran80@mail.ru***

Исследование низкоразмерного магнетизма – важная задача материаловедения и физики твердого тела. Экспериментальный интерес к этой проблеме связан с необычными магнитными свойствами органических соединений, ферромагнитных пленок, мультислоев и поверхностей, и с другими исследованиями [1-3]. Особый класс низкоразмерных магнитных систем с локальными моментами – квазиодномерные соединения, содержащие цепочки магнитных атомов со слабым межцепочечным обменом, в некоторых случаях такие системы описываются моделью Изинга [3]. Экспериментальные и теоретические исследования квазиодномерных магнетиков представляют большие трудности, что делает необходимым на первом этапе компьютерное моделирование процессов в таких системах [4].

В модифицированной модели одномерного изинговского наномангнетика с граничными условиями «оборванные концы» учитываются ближнее взаимодействие (j_1), взаимодействие вторых (j_2) и третьих соседей (j_3), а также четырехчастичное взаимодействие (j_4). Таким образом, учитываются все возможные взаимодействия в пределах четырех соседних узлов и гамильтониан магнетика имеет вид [5]

$$\varepsilon = -h \sum_{i=1}^N s_i - j_1 \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} - j_2 \sum_{i=1}^{N-2} s_i s_{i+2} - j_3 \sum_{i=1}^{N-3} s_i s_{i+3} - j_4 \sum_{i=1}^{N-3} s_i s_{i+1} s_{i+2} s_{i+3}, \quad (1)$$

где N – количество узлов в одномерном магнетике (размер системы); i – номер узла; s_i – проекция безразмерного вектора спинового магнитного момента i -го узла на ось z , вдоль которой направлена напряженность внешнего магнитного поля; h – энергия взаимодействия узла с внешним магнитным полем. Граничные условия «оборванные (свободные) концы» моделируют реальную одномерную цепочку, например, на поверхности кристалла [3]. Удобно выразить гамильтониан через магнитную энергию взаимодействия ближайших соседей (обменный интеграл [4]) $E = \varepsilon/|j_1|$, тогда

$$E = -H \sum_{i=1}^N s_i \pm \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} - J_2 \sum_{i=1}^{N-2} s_i s_{i+2} - J_3 \sum_{i=1}^{N-3} s_i s_{i+3} - J_4 \sum_{i=1}^{N-4} s_i s_{i+4} \dots \quad (2)$$

Если энергия взаимодействия ближайших соседей положительна, то перед вторым слагаемым в гамильтониане ставится знак «–», если отрицательна, то знак «+».

Немагнитные примеси занимают место в узлах цепочки и размер системы складывается из количества немагнитных (N_a) и магнитных (N_m) узлов. Была исследована модель с фиксированным положением немагнитных примесей. В ней, при формировании начальных конфигураций для параллельных реализаций алгоритма Метрополиса, немагнитные примеси принимают в наномagnetике случайные равновероятные позиции. После этого в течение всего процесса положение примесей не меняется, что соответствует низким температурам («замороженные» примеси). Таким образом, в магнетике изменяются только направления спинов магнитных узлов в соответствии с алгоритмом Метрополиса.

В настоящей работе конечное состояние системы соответствует антиферромагнитной фазе ($j_1 < 0$), а начальная ферромагнитная фаза достигается включением большого внешнего магнитного поля ($|H| > 2$). Для моделирования кинетики фазового перехода ферромагнетик-антиферромагнетик использовался алгоритм Метрополиса, который учитывает влияние температуры T на процесс [6]. Подобные превращения наблюдаются экспериментально [4]. Мерой времени перехода ферромагнетик-антиферромагнетик (времени релаксации τ) является

количество шагов Монте-Карло (NMCS), за которое система достигнет антиферромагнитной фазы. Удобно использовать безразмерную приведенную температуру: $\Theta = kT/|j_1|$.

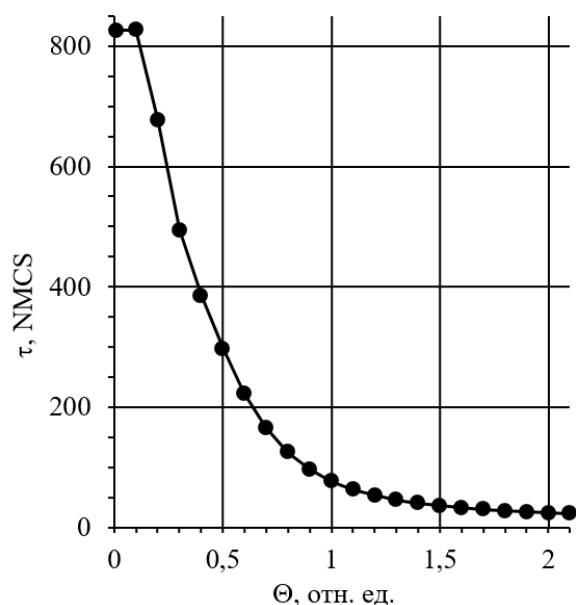


Рис. 1. Зависимость времени релаксации τ от температуры Θ .
 $N = 10, N_a = 0, j_1 < 0, H = J_2 = J_3 = J_4 = 0$.

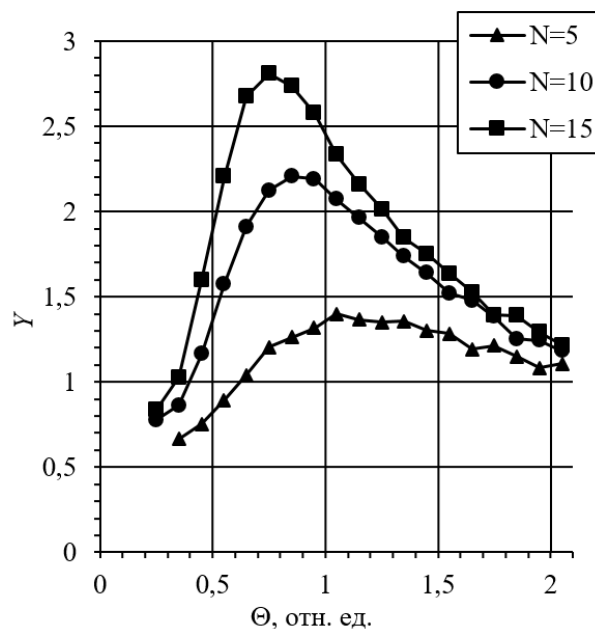


Рис. 2. Зависимость кинетического критического индекса Y от температуры Θ .
 $N_a = 0, j_1 < 0, H = J_2 = J_3 = J_4 = 0$.

В настоящей работе был исследован кинетический критический индекс Y . Он характеризует зависимость времени релаксации перехода ферромагнетик – антиферромагнетик от температуры [6]. Чем больше значение индекса, тем быстрее уменьшается время релаксации с ростом температуры. Зависимость времени релаксации от температуры имеет вид [6]

$$\tau \propto \Theta^{-Y}. \quad (3)$$

В теории среднего поля кинетический критический индекс Y равен 1 [7].

График зависимости времени релаксации от температуры имеет аномальную низкотемпературную область, в которой время релаксации не зависит от температуры (рис. 1). Аномальная область наблюдалась при всех рассмотренных размерах магнетика (до $N = 21$) и количества примесей. Значения кинетического критического индекса Y для аномальной области равны

0. Вне аномальной области график зависимости индекса Y от температуры имеет один максимум (рис. 2). При увеличении размеров наномангнетика значение максимума растет, при этом максимум смещается в сторону меньших температур. Максимальное значение индекса составило 3,2 при самом большом из рассмотренных размеров системы ($N = 21$). В термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) индекс Y равен $Y_\infty = 2,78$. Все значения индекса в термодинамическом пределе, в том числе и ниже приведенные, рассчитаны для температуры $\Theta = 0,95$.

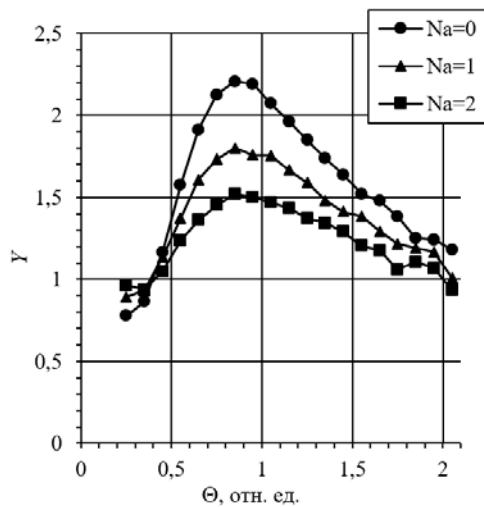


Рис. 3. Зависимость кинетического критического индекса Y от температуры Θ . $N = 10$, $j_1 < 0$, $H = J_2 = J_3 = J_4 = 0$.

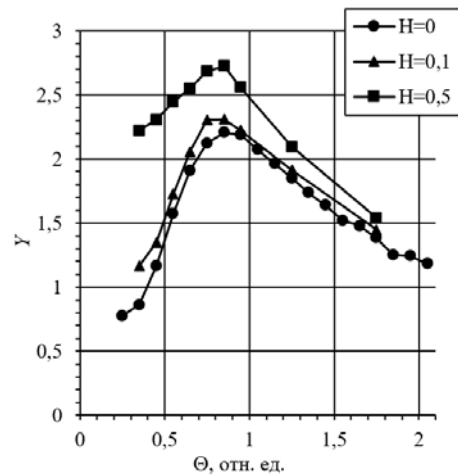


Рис. 4. Зависимость кинетического критического индекса Y от температуры Θ . $N = 10$, $N_a = 0$, $j_1 < 0$, $J_2 = J_3 = J_4 = 0$.

Наличие немагнитных примесей уменьшает значение максимума температурной зависимости кинетического критического индекса Y (рис. 3). При этом вдоль оси температур максимум не смещается.

Магнитное поле способствует увеличению кинетического индекса Y (рис. 4), не меняя положение максимума. Максимальное значение индекса Y равно 5,8 при температуре $\Theta = 0,35$, для наибольших из рассмотренных количества узлов ($N = 21$) и энергии магнитного взаимодействия ($H = 0,5$). В термодинамическом пределе составили: $H = 0,1 - Y_\infty = 2,87$; $H = 0,3 - Y_\infty = 3,23$; $H = 0,5 - Y_\infty = 3,77$.

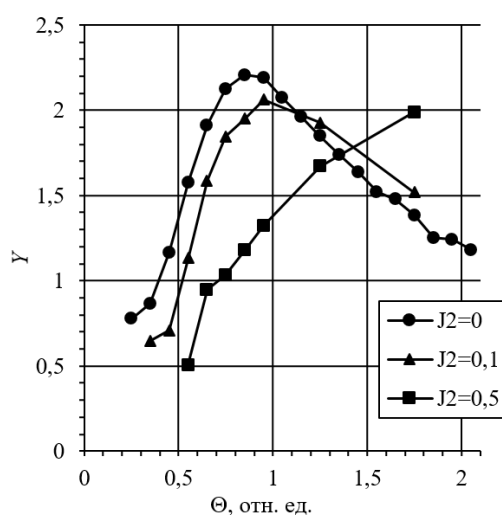


Рис. 5. Зависимость кинетического критического индекса Y от температуры Θ ($N = 10, N_a = 0, j_1 < 0, H = J_3 = J_4 = 0$).

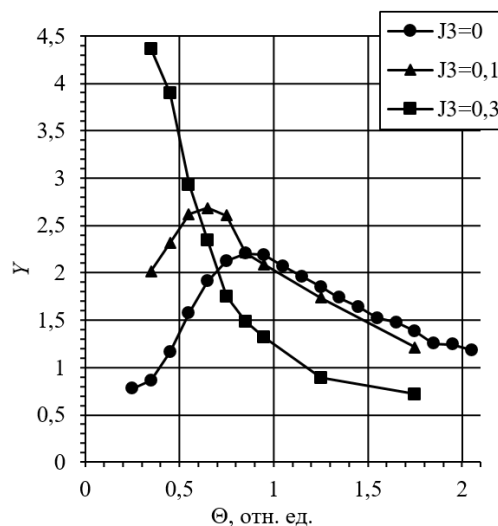


Рис. 6. Зависимость кинетического критического индекса Y от температуры Θ . ($N = 10, N_a = 0, j_1 < 0, H = J_2 = J_4 = 0$).

Энергия вторых соседей смещает максимум температурной зависимости кинетического индекса Y в сторону больших температур и уменьшает максимальное значение (рис. 5). При малых температурах взаимодействие вторых соседей уменьшает индекс, а при больших температурах увеличивает. Значения индекса Y в термодинамическом пределе уменьшаются с ростом энергии взаимодействия вторых соседей: $J_2 = 0,1 - Y_\infty = 2,52$; $J_2 = 0,3 - Y_\infty = 2,48$; $J_2 = 0,5 - Y_\infty = 2,18$.

Взаимодействие третьих соседей оказывает противоположное действие на температурную зависимость кинетического критического индекса Y — максимум становится выше и смещается к меньшим температурам (рис. 6). При малых температурах взаимодействие третьих соседей значительно увеличивает значение индекса Y , при больших — уменьшает. Увеличение энергии взаимодействия третьих соседей приводит к уменьшению индекса в термодинамическом пределе: $J_3 = 0,1 - Y_\infty = 1,31$; $J_3 = 0,2 - Y_\infty = 0,84$; $J_3 = 0,3 - Y_\infty = 0,67$.

Четырехчастичное взаимодействие подобно взаимодействию вторых соседей смещает максимум температурной зависимости кинетического критического индекса Y в сторону больших температур, но при этом увеличивает его значение. При малых температурах, с ростом энергии четырехчастичного

взаимодействия индекс Y уменьшается. Для количества узлов больше семи при приближении к аномальной области температуры индекс Y увеличивается, в результате чего температурная зависимость имеет минимум. В термодинамическом пределе учет четырехчастичного взаимодействия уменьшает значения индекса: $J_{1-4} = 0,1 - Y_{\infty} = 2,02$; $J_{1-4} = 0,3 - Y_{\infty} = 1,47$; $J_{1-4} = 0,5 - Y_{\infty} = 1,37$.

Таким образом, температурная зависимость кинетического критического индекса Y имеет максимум, который смещается в сторону меньших температур при увеличении магнитного поля и энергии взаимодействия третьих соседей и смещается вправо при увеличении энергий взаимодействия вторых соседей и четырехчастичного взаимодействия. Внутри аномальной области температуры вблизи абсолютного нуля индекс Y равен нулю. Скорее всего, этот результат является артефактом модели.

При учете энергии взаимодействия третьих соседей имеется максимум. Максимальное значение индекса не превышает 6. В термодинамическом пределе значения кинетического индекса для рассмотренных параметров меняются от 0,67 до 3,77. Следовательно, поведение одномерного изинговского наномангнетика в рассмотренной модели является более разнообразным, чем предсказывает теория среднего поля, в которой $Y = 1$, что должно лучше соответствовать эксперименту.

Список литературы

1. Носкова Н.И. Субмикрористаллические и нанокристаллические металлы и сплавы / Н.И. Носкова, Р.Р.Мулюков – Екатеринбург: УрО РАН, 2003. – 279 с.
2. Val'kov V.V. The modification of low-temperature magnetic properties of the Fe-based double-zigzag single-chain magnet under irradiation / V.V.Val'kov, M.S.Shustin // J. Magn. Magn. Mat. 440, 2017. – P.19.
3. Кудасов Ю.Б. Фрустрированные решетки изинговских цепочек / Ю.Б. Кудасов, А.С.Коршунов, В.Н.Павлов // УФН. 182, 2012 – С. 1249.
4. Белим С.В. Исследование фазовых переходов в системах с конкурирующими взаимодействиями в магнитном поле методом компьютерного

моделирования / С.В.Белим //Письма о материалах. 10 (1), 2020. – С. 5.

5. Spirin D.V. Percolation effect in quasi-one-dimensional Ising ragged magnet / D.V.Spirin, V.N.Udodov // Letters on Materials 10 (3), 2020. – pp. 334-339.

6. Бекстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. / Р.Бекстер – М.: Мир, 1988. – 487 с.

7. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.10. Физическая кинетика. – Изд. 2 / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. – М.: Физматлит, 2007. – 536 с.

ТЕОРИЯ ТУРБУЛЕНТНОСТИ ЛАНДАУ КАК ТЕОРИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

В.Н.Удодов

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

Введение

В работе Л.Д. Ландау «К проблеме турбулентности» (1944 г.) рассмотрен переход от ламинарного движения к турбулентному при увеличении числа Рейнольдса [1, 2]. Однако в этой статье, как и в книге [3] не проведена аналогия с теорией фазовых переходов (ФП) Ландау [4], в частности, с теорией сверхпроводимости Гинзбурга-Ландау [5]. Это удивительно, так как в 1944 г. общая теория ФП Ландау уже существовала (1935-1937 гг) [6-8]. Ниже показано, что упомянутая теория турбулентности укладывается в обобщенную теорию ФП Ландау, правда для неравновесного случая. При этом рассмотрены некоторые новые варианты теории турбулентности в рамках подхода Л.Д. Ландау.

1. Теория турбулентности Л.Д. Ландау

Сначала напомним теорию Л.Д. Ландау турбулентности [1-3]. Существует критическое число Рейнольдса [3]

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

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

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

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

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

где γ_1 – мнимая часть частоты, причем она отрицательна при малых числах Рейнольдса. При $R = R_C$ появляется одна частота, мнимая часть которой обращается в нуль [1-3]. При $R > R_C$ у этой частоты $\gamma_1 > 0$, причем для чисел Рейнольдса R , близких к критическому, γ_1 мала. Возмущение скорости (отклонение от ламинарного движения), соответствующее этой частоте, имеет вид [3]:

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

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

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

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

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

где введено обозначение x для квадрата модуля амплитуды. Это начало разложения в ряд по степеням A и A^* [1-3]. Оказывается, в простейшем случае разложение имеет вид [3]

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

где α – положительная или отрицательная постоянная (постоянная Ландау). Сначала считаем постоянную Ландау положительной $\alpha > 0$. Можно показать, что в этом случае в пределе бесконечного времени (тогда x не зависит от времени) x стремится к [3]

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

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

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

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

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

При числе Рейнольдса $R < R_C$, как можно показать из (7) и (9), амплитуда возмущения скорости равна нулю, то есть ламинарное движение устойчиво, что и следовало ожидать.

Теперь разберем случай отрицательной постоянной Ландау $\alpha < 0$, когда разложение (7) принимает вид [3]

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

где α_1 – положительная константа. В стационарном случае (в частности, при $t \rightarrow \infty$) x не зависит от времени, то есть производная равна нулю

$$\frac{dx}{dt} = 2\gamma_1 x - \alpha x^2 - \alpha_1 x^3 = 0. \quad (11')$$

Это уравнение имеет три корня: одно нулевое решение (ламинарное движение) и два решения квадратного уравнения

$$2\gamma_1 - \alpha x - \alpha_1 x^2 = 0 \quad (12)$$

$$x_{\max} = |A|_{\max}^2 = -\frac{\alpha}{2\alpha_1} \pm \left[\frac{\alpha^2}{4\alpha_1^2} + \frac{2\gamma_1}{\alpha_1} \right]^{1/2}. \quad (13)$$

Величина γ_1 дается формулой (9). Нижняя ветвь корня соответствует неустойчивому движению [3]. В этом случае есть два критических числа Рейнольдса: одно прежнее R_C и второе R'_C , которое получится, если подкоренное выражение приравнять к нулю

$$R'_C = R_C - \frac{\alpha_2 \alpha^2}{\alpha_1} < R_C. \quad (14)$$

Если $R < R'_C$, то устойчиво только ламинарное движение; если $R > R_C$, то устойчиво только решение (13) (верхняя ветвь корня), причем с конечной амплитудой; если $R_C > R > R'_C$, то устойчивы два решения – нулевое (ламинарное) и турбулентное (13) со знаком + перед корнем, причем ламинарное решение метастабильно [3]. Подчеркнем, что рассмотренная теория применима лишь к начальной стадии развития турбулентности.

2. Аналогия

В общей теории ФП Ландау есть параметр порядка η [4], который равен нулю в одной фазе (неупорядоченная фаза) и отличен от нуля в упорядоченной фазе. В теории турбулентности Ландау комплексная амплитуда возмущения скорости (5) равна нулю при ламинарном движении и не равна нулю при турбулентном движении. Более того, в теории сверхпроводимости Гинзбурга-Ландау роль параметра порядка играет комплексная эффективная волновая функция сверхпроводящих электронов [5, 9]. Следовательно, в теории турбулентности Ландау в качестве параметра порядка выступает амплитуда возмущения скорости

$$\eta = A(t) , \quad (15)$$

квадрат модуля которой обозначен в данной работе за x (см. (6), (13)). Управляющим параметром является число Рейнольдса, которое пропорционально скорости среды. Для обычных равновесных ФП управляющим параметром является температура, давление или напряженность внешнего поля [4]. Поскольку амплитуда возмущения скорости среды комплексная функция, то параметр порядка для перехода от ламинарного движения к турбулентному является двухкомпонентным (вещественная и мнимая части амплитуды могут изменяться независимо), так же как в теории сверхпроводимости Гинзбурга-Ландау и в теории сверхтекучести [9].

Эта аналогия подтверждается следующими соображениями. Сначала разберем случай положительной постоянной Ландау $\alpha > 0$. При увеличении числа Рейнольдса R от малых значений сначала ламинарное движение устойчиво, амплитуда возмущения равна нулю, что соответствует неупорядоченной фазе. Как только R станет больше R_C , появится ненулевое периодическое возмущение скорости сколько угодно малой амплитуды, которая будет расти по закону (10)

$$|\eta| = |A|_{\max} \approx a_1 (R - R_C)^{1/2} \propto (R - R_C)^\beta, R \geq R_C . \quad (16)$$

Здесь β – критический индекс параметра порядка, который в теории турбулентности Ландау, как мы видим, равен

$$\beta = 1/2, \quad (17)$$

что совпадает с обычным значением этого индекса в теории Ландау ФП второго рода [4]. Ненулевой параметр порядка (16) соответствует упорядоченной фазе (при $R > R_C$ движение турбулентно).

Переход от ламинарного движения к турбулентному при увеличении числа Рейнольдса при $\alpha > 0$ аналогичен ФП второго рода, так как при этом состояние меняется плавно, без скачков – параметр порядка является непрерывной функцией числа Рейнольдса.

Случай $\alpha < 0$ соответствует ФП первого рода. Действительно, при увеличении числа Рейнольдса от малых значений до первого критического значения R'_C движение среды ламинарно. В интервале $R_C > R > R'_C$ есть два устойчивых движения: ламинарное и турбулентное (первое метастабильно), но при медленном увеличении R сначала реализуется ламинарное движение, которое далее скачком перейдет в турбулентное движение, при этом параметр порядка испытывает конечный скачок. Наличие метастабильного состояния и скачка параметра порядка (конечного скачка состояния при ФП) характерно для ФП первого рода [4]. Возможно также существование в теории турбулентности «двухфазного» состояния: ламинарный слой около стенки и турбулентное движение вдали от нее, правда, межфазной границы в данном случае нет [3].

При увеличении и при уменьшении числа Рейнольдса процессы могут происходить различным образом ($\alpha < 0$): скачки состояния («срыв») туда и обратно будут происходить при разных значениях числа Рейнольдса из-за тепловых флуктуаций (гистерезис). Такие явления также характерны для ФП 1-го рода.

Возможен промежуточный случай (не рассмотрен в теории турбулентности Л.Д. Ландау), когда постоянная Ландау равна нулю $\alpha = 0$ ($\gamma_1 \neq 0$) (см. (11))

$$\frac{dx}{dt} = 2\gamma_1 x - \alpha_1 x^3. \quad (18)$$

В стационарном случае производная по времени равна нулю

$$\frac{dx}{dt} = 2\gamma_1 x - \alpha_1 x^3 = 0 . \quad (19)$$

Это уравнение имеет три решения: нулевое, соответствующее ламинарному движению, и два корня уравнения

$$2\gamma_1 = \alpha_1 x^2, \alpha_1 > 0 , \quad (20)$$

один из этих корней не имеет физического смысла. Другой корень

$$x = |A|^2 \propto \gamma_1^{1/2} \propto (R - R_C)^{1/2} \quad (21)$$

или

$$|A| = |\eta| \propto (R - R_C)^{1/4} = (R - R_C)^\beta . \quad (22)$$

В этом случае критический индекс параметра порядка равен

$$\beta = 1/4 . \quad (23)$$

Этот случай также соответствует непрерывному ФП с нулевым скачком параметра порядка.

Наконец, возможен еще один случай, соответствующий критической точке обычной теории ФП Ландау (критическая точка ФП второго рода или трикритическая точка для равновесных переходов) [4]. В этой точке

$$\gamma_1 = 0, \alpha = 0 . \quad (24)$$

При приближении к трикритической точке γ_1 и α зависят от числа Рейнольдса, причем для γ_1 (в простейшем случае) верна формула (9), для α верна аналогичная формула

$$\alpha = 2b(R - R_C) = 2b\tau, b = \text{const} > 0 . \quad (25)$$

Для простоты пусть в (13)

$$\alpha_1 = +1 . \quad (25')$$

Тогда (13) примет вид

$$x_{\max} = |A|_{\max}^2 = |\eta|^2 = -\frac{\alpha}{2} \pm \left[\frac{\alpha^2}{4} + 2\gamma_1 \right]^{1/2} . \quad (26)$$

Подставим сюда (9) и (25)

$$|\eta|^2 = -b\tau \pm [b^2\tau^2 + 2a\tau]^{1/2} = -b\tau \pm \tau^{1/2}(b^2\tau + 2a)^{1/2} . \quad (27)$$

При $\tau = (R - R_C) \rightarrow 0$

$$|\eta|^2 = -b\tau \pm \tau^{1/2} (2a)^{1/2} \propto \tau^{1/2} \propto \tau^{2\beta} . \quad (28)$$

Следовательно, критический индекс параметра порядка при приближении к трикритической точке переходов (ламинарное движение)→(турбулентное движение) равен

$$\beta = +1/4 . \quad (29)$$

Это согласуется с теорией равновесных ФП Ландау [4]. Этот ФП также является непрерывным – с нулевым скачком параметра порядка.

Возможен теоретически более экзотический случай, когда вместо (9) будет

$$\gamma_1 \approx a(R - R_C)^3 = a\tau^3 . \quad (30)$$

Дело в том, что γ_1 должна менять знак в точке ФП, следовательно, τ должна быть в нечетной степени. Теперь (26) примет вид

$$|\eta|^2 = -b\tau \pm [b^2\tau^2 + 2a\tau^3]^{1/2} = -b\tau \pm \tau(b^2 + 2a\tau)^{1/2} . \quad (31)$$

Выражение под корнем преобразуем с точностью до членов второго порядка малости

$$b^2 + 2a\tau \approx b^2 + 2b\frac{a\tau}{b} + \left(\frac{a\tau}{b}\right)^2 = \left(b + \frac{a\tau}{b}\right)^2 . \quad (32)$$

(31) примет вид

$$|\eta|^2 \approx -b\tau \pm \tau\left(b + \frac{a\tau}{b}\right) . \quad (33)$$

Нижний знак не имеет физического смысла, так как левая часть неотрицательна, следовательно

$$|\eta|^2 \approx \frac{a\tau^2}{b} . \quad (34)$$

Отсюда найдем

$$|\eta|^2 \propto \tau^2 \propto \tau^{2\beta} . \quad (35)$$

Следовательно, в этом экзотическом случае трикритической точки для перехода ламинарность→турбулентность критический индекс параметра порядка равен

$$\beta = 1 , \quad (36)$$

ФП является и в этом случае непрерывным.

Теория Ландау-Халатникова для слабо неравновесных состояний основана

на формуле [10].

$$\frac{d\eta}{dt} = -\gamma_2 \frac{\partial \Omega}{\partial \eta}, \quad \gamma_2 = \text{const} > 0, \quad (37)$$

где Ω является термодинамическим потенциалом. Применим это выражение для нашего случая. Используем (11) и (26), причем для краткости временно считаем, что

$$|\eta| \equiv \eta, \quad (38)$$

тогда

$$\frac{dx}{dt} = \frac{d(\eta^2)}{dt} = 2\gamma_1 \eta^2 - \alpha \eta^4 - \alpha_1 \eta^6 \quad (39)$$

или

$$2\eta \frac{d\eta}{dt} = 2\gamma_1 \eta^2 - \alpha \eta^4 - \alpha_1 \eta^6. \quad (40)$$

Производная от параметра порядка по времени равна

$$\frac{d\eta}{dt} = \gamma_1 \eta - \frac{\alpha}{2} \eta^3 - \frac{\alpha_1}{2} \eta^5 = -\gamma_2 \frac{\partial \Omega}{\partial \eta}. \quad (41)$$

Отсюда (интегрируя) найдем термодинамический потенциал

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \eta^2 + \frac{\alpha}{8\gamma_2} \eta^4 + \frac{\alpha_1}{12\gamma_2} \eta^6. \quad (42)$$

С точностью до обозначений потенциал совпадает с обычным разложением в теории ФП Ландау [4]. Для ламинарного движения (неупорядоченная фаза) параметр порядка в равновесии равен нулю, считая

$$\eta \rightarrow 0, \quad (43)$$

найдем из (41) (см. [10])

$$\frac{d\eta}{dt} \approx \gamma_1 \eta = -\frac{\eta}{\tau_0}. \quad (44)$$

Отсюда время релаксации параметра порядка равно (см. (9))

$$\tau_0 = \frac{-1}{\gamma_1} = \frac{-1}{a\tau} \propto \frac{1}{R - R_C}. \quad (45)$$

При приближении к точке непрерывного ФП $R \rightarrow R_C$ и время релаксации стремится к бесконечности (критическое замедление) [10]. При этом вводят

кинетический индекс y [10] для температурных ФП

$$\tau_0 \propto \frac{1}{(T - T_C)^y}, \quad y > 0. \quad (46)$$

Для рассматриваемого случая формула примет вид

$$\tau_0 \propto \frac{1}{(R - R_C)^y} = \tau^{-y}, \quad y > 0. \quad (47)$$

Сравнивая с (45), найдем для перехода от ламинарного движения к турбулентному

$$y = 1, \quad (48)$$

что совпадает с обычным значением в теории ФП Ландау-Халатникова [10]. Однако в случае экзотической трикритической точки (см. (30)) значение кинетического индекса изменится

$$y = 3. \quad (49)$$

Разумеется, проведенная аналогия является относительной: движение жидкости или газа с трением (вязкостью) – существенно неравновесный процесс, тогда как обычная теория ФП Ландау описывает равновесные процессы [4]. Разложение по параметру порядка типа (7) или (11) в обычной теории ФП Ландау существует для термодинамического потенциала [4]. В теории турбулентности Ландау это разложение для скорости изменения x (см. (7), (11))

$$x = |A|^2 = |\eta|^2. \quad (50)$$

Равновесному состоянию классической равновесной теории ФП в теории турбулентности соответствует стационарное состояние, когда производная по времени от квадрата модуля амплитуды возмущения скорости равна нулю (см. (11')).

3. Заключение

Проведена аналогия между теорией турбулентности Л.Д. Ландау и общей теорией ФП Ландау. Показано, что на начальных стадиях развития турбулентности возможны ФП, аналогичные переходам, как первого, так и второго рода. По аналогии с теорией сверхпроводимости Гинзбурга-Ландау определен двухкомпонентный параметр порядка для ФП от ламинарного

движения к турбулентному. Возможно, это сделано впервые.

Показано, что в теории турбулентности в рамках подхода Ландау возможен также неравновесный ФП типа критической (трикритической) точки, в том числе экзотического типа, когда критический индекс параметра порядка равен единице.

Аналогия не является полной, так как переход от ламинарного движения к турбулентному является существенно неравновесным процессом, тогда как обычная теория ФП Ландау относится к термодинамически равновесным состояниям [4]. Установлена также аналогия с теорией Ландау-Халатникова [10] для слабо неравновесных состояний. Для перехода в турбулентное состояние впервые найден кинетический индекс ν .

В рамках данного подхода, видимо, возможно рассмотрение неоднородной турбулентности.

Остается открытым вопрос о сопоставлении полученных результатов с экспериментальными данными или с данными численных экспериментов. Было бы интересно также найти другие критические индексы для этого неравновесного ФП и учесть флуктуационные поправки.

Список литературы

1. Ландау Л.Д. К проблеме турбулентности / Л.Д.Ландау // ДАН СССР. — 1944. — Т.44. С.339 – 344.
2. Ландау Л.Д. Собрание трудов / Л.Д.Ландау. — М. Наука, 1969. — Т.1 (статья 50) — 512 с.
3. Ландау Л.Д. Теоретическая физика. Т.6. Гидродинамика. 4-е изд. / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. — М., Наука, 1988. — 733 с.
4. 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.
5. Гинзбург В.Л. К теории сверхпроводимости / В.Л.Гинзбург, Л.Д.Ландау // ЖЭТФ. — 1950. — Т.20. С.1064.
6. Ландау Л.Д. К теории аномалий теплоемкости / Л.Д.Ландау // Phys. Zs. Sowjet. — 1935. — Т.8. С.113.

7. Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов. I / Л.Д.Ландау // Phys. Zs. Sowjet. — 1937. — Т.11. С.26. ЖЭТФ. — 1937. — Т.7. С.19.
8. Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов. II / Л.Д.Ландау // Phys. Zs. Sowjet. — 1937. — Т.11. С.545. ЖЭТФ. — 1937. — Т.7. С.627.
9. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.9. Статистическая физика. Часть 2. Теория конденсированного состояния / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. — М.: Физматлит, 2004. — 496 с.
10. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.10. Физическая кинетика. — Изд. 2 / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. — М.: Физматлит, 2007. — 536 с.

НОВЫЕ СООТНОШЕНИЯ МЕЖДУ КРИТИЧЕСКИМИ ИНДЕКСАМИ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

В.Н. Удодов

Хакасский государственный университет имени Н.Ф. Катанова, Инженерно-технологический институт, кафедра промышленного, гражданского строительства и техносферной безопасности, кафедра программного обеспечения вычислительной техники и автоматизированных систем, Россия, Хакасия, г. Абакан, пр. Ленина, д. 92, 655017 udodov@khsu.ru

Рассмотрены фазовые переходы (ФП) при температуре абсолютного нуля («квантовые» ФП). Приведена интерполяционная формула для эффективной размерности пространства, которая справедлива как для положительной критической температуры, так и для критической температуры, равной нулю. Эта формула имеет общий характер. Рассмотрены новые соотношения между критическими индексами, связывающие динамические и статические индексы при низких температурах при произвольной размерности пространства.

Введение

Фазовые переходы (ФП) уже более 60 лет изучают в рамках концепции критических индексов и парадигмы скейлинга [1-12]. Значительное внимание привлекают ФП при температуре абсолютного нуля («квантовые» ФП) [4-7], например, переход в сверхпроводящее состояние [6, 9].

Цель работы: рассмотреть ФП при абсолютном нуле при учете идей квантовых ФП и обобщенной парадигмы скейлинга [8, 11-13]. Выведены новые соотношения между динамическими (индекс z) и статическими (термодинамическими (индексы теплоемкости и корреляционной длины)) критическими индексами, имеющие общий характер для произвольной размерности пространства. Известные соотношения получаются из предложенных как предельный частный случай.

1. Квантовые фазовые переходы

Квантовыми ФП обычно называют ФП при температуре абсолютного нуля

[5, 6], когда поведение системы определяется квантовыми (нетепловыми) флуктуациями. Однако квантовые ФП проявляются и при конечных температурах (предпереходные явления), иногда даже близких к комнатным [6, 12]. Оказывается, в этом случае статику нельзя отделить от динамики и свойства зависят от динамического критического индекса z [5, 6]

$$\tau \propto \xi^z, \quad (1)$$

где τ – время релаксации параметра порядка (например, для ферромагнетика параметром порядка является спонтанная намагниченность), ξ – корреляционная длина [1-9]. Все эти величины измеряются экспериментально или могут быть рассчитаны, в том числе методами компьютерного моделирования [1, 2, 9-13]. В нулевом поле корреляционная длина зависит от температуры [1-3]

$$\xi \propto \tau^{-\nu}, \tau = |T - T_C|, \tau \rightarrow 0.$$

Здесь $\nu > 0$ – критический индекс корреляционной длины [1-3].

При приближении к квантовой критической точке (при температуре абсолютного нуля) в отношении критических свойств (критических индексов) система приобретает эффективную пространственную размерность [5, 6] (d – размерность пространства)

$$d_{eff} = d + z, T_C = 0. \quad (2)$$

Здесь динамический индекс z играет роль дополнительных пространственных измерений из-за неравновесных процессов вблизи квантовой критической точки при нулевой температуре ФП, когда существенны чисто квантовые флуктуации, связанные с соотношениями неопределенностей [3, 6].

2. Соотношения между индексами

Согласно [1-12] имеем для обычного случая положительной критической температуры $T_C > 0$ классическое соотношение скейлинга

$$\alpha = 2 - d\nu \quad (T_C > 0). \quad (3)$$

Однако для нулевой критической температуры ФП формула меняет вид [8, 11, 12]

$$\alpha = 1 - d \nu (T_C = 0) . \quad (4)$$

Здесь ФП происходит при понижении температуры при постоянных других параметрах.

В ряде случаев (например, для ФП в сверхпроводящее состояние) существует линия ФП, которая начинается при конечных температурах, а далее при изменении параметров температура ФП плавно уменьшается и обращается в ноль [1, 9]. В этом случае выражение (2) для эффективной размерности пространства должно быть модифицировано. Может быть предложена следующая интерполяционная формула [14, 15]

$$d_{eff} = d + z(1 - S_I), T_C \geq 0 . \quad (5)$$

S_I -функция равна [13]

$$S_I = (1 + A_1 |t|^m) \left(\frac{T_C}{T} \right)^n, T_C \geq 0, \quad (6)$$

где $t = T - T_C$, $T_C \geq 0$, A_1 – константа любого знака; m, n – положительные константы. Константы A_1, m, n , критическую температуру T_C можно найти при компьютерной обработке точных экспериментальных данных для определенного ФП или методами компьютерного моделирования (на основе экспериментальных данных), однако это пока не сделано. При приближении к положительной критической температуре S_I -функция стремится к единице и эффективная размерность пространства стремится к обычной размерности пространства d . Если же критическая температура равна нулю (что возможно, например, для сверхпроводимости в магнитном поле и в ряде других случаев [6]), то S_I -функция равна нулю и получим формулу (2) для квантового ФП.

Отметим, что в (4) не учтены особенности квантовых ФП. Общая интерполяционная формула имеет вид

$$\alpha = 1 + S_I - d_{ef} \nu (T_C \geq 0) . \quad (7)$$

Действительно, если критическая температура положительна и $T \rightarrow T_C > 0$, то получим обычное соотношение скейлинга (3). Если же $T_C=0, T>0$, то получим новую формулу

$$\alpha = 1 - (d + z)\nu \quad (T_C = 0, T > 0) . \quad (8)$$

Можно предполагать, что (7), по крайней мере качественно, описывает и тот случай, когда сначала критическая температура положительна, но далее при изменении параметров (например, магнитного поля) $T_C \rightarrow 0$. Такая ситуация возможна при переходе в сверхпроводящее состояние [6]. В этом случае критическая температура является переменной величиной и критический индекс теплоемкости согласно (7) может зависеть от T_C . То, что критический индекс параметра порядка при приближении к квантовой критической точке может зависеть от T_C отмечено в [6].

Эти соображения вносят изменения и в некоторые другие соотношения скейлинга, например, известно следствие статического скейлинга (подробности см. в [1])

$$d - 2 + \eta = \frac{2d}{\delta + 1} = \frac{2d\beta}{2 - \alpha} \quad (T_C > 0) . \quad (9)$$

В свете изложенного эта формула приобретает вид

$$d_{eff} - 2 + \eta = \frac{2d_{eff}}{\delta + 1} = \frac{2d_{eff}\beta}{1 + S_I - \alpha} \quad (T_C \geq 0) . \quad (10)$$

Для квантового ФП получим

$$d + z - 2 + \eta = \frac{2(d + z)}{\delta + 1} = \frac{2(d + z)\beta}{1 - \alpha} \quad (T_C = 0, T > 0) . \quad (11)$$

Определения критических индексов η (индекс Фишера определяет поведение корреляционной функции) и δ (определяет форму критической изотермы) приведены в [1-3].

К сожалению, значения критических индексов вблизи абсолютного нуля, видимо, пока неизвестны. Во всяком случае, это касается экспериментальных данных. Поэтому ограничимся предварительными соображениями. Известно разложение для индекса z для магнитных ФП [5] (до линейного слагаемого)

$$z \approx 1 + \frac{(4 - N)(4 - d) + (2N + 4)\varepsilon_\tau}{16(N - 1)} . \quad (12)$$

Здесь N – число компонент параметра порядка, квантовой критической точке

соответствует [5]

$$\varepsilon_{\tau} = 1 . \quad (13)$$

Для двухкомпонентного параметра порядка (x, y модель [1]) в квантовой критической точке найдем

$$z \approx 1 + \frac{2(4-d)+8}{16} . \quad (14)$$

Для одномерного случая получим

$$z(d=1) \approx 1.875 \ (T_C = 0) ; \quad (15)$$

для двумерного пространства

$$z(d=2) \approx 1.75 \ (T_C = 0) . \quad (16)$$

Для других ФП динамический индекс z может равняться 1, 2, 4 [10], однако для нулевой критической температуры относительно значений этого индекса вопрос остается открытым, особенно это касается экспериментальных данных. Эксперименты вблизи абсолютного нуля являются чрезвычайно трудоемкими из-за резкого возрастания времени релаксации и по другим причинам.

Что касается критического индекса теплоемкости, то из третьего начала термодинамики [3, 6] следует, что для квантового ФП этот индекс должен быть отрицательным, в экзотических случаях может равняться нулю.

3. Заключение

Предложены новые интерполяционные соотношения между динамическими и статическими критическими индексами, когда критическая температура равна нулю («квантовые» ФП). Учтена зависимость от динамического критического индекса z . Известные соотношения скейлинга получаются из предложенных как предельный частный случай.

Приведено выражение для эффективной размерности пространства при приближении к точке квантового ФП, которое содержит динамический индекс z и критическую температуру. Это выражение имеет общий характер, то есть, верно для любого фазового перехода при произвольной размерности пространства.

Предложены две интерполяционные формулы, связывающие критические индексы z , корреляционной длины, теплоемкости, индекс Фишера и δ . В эти формулы входит размерность пространства, критическая температура и абсолютная температура. Можно предполагать, что эти формулы применимы и к тому случаю, когда сначала критическая температура T_c конечна, а далее при изменении параметров T_c плавно стремится к нулю. В этом случае индексы должны непрерывно зависеть от T_c . Такая ситуация известна [6], но является экзотической, по крайней мере для обычных температурных ФП.

Дальнейшее развитие рассмотренных идей возможно при появлении новых экспериментальных, теоретических или численных данных для ФП при температурах вблизи абсолютного нуля.

Рассмотренный подход применим к квантовым фазовым переходам [5, 6], например, к переходу в сверхпроводящее или сверхтекучее состояния (в смеси изотопов гелия) вблизи абсолютного нуля, для систем с тяжелыми фермионами и в других случаях [5, 6].

Список литературы

1. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления / Г.Стенли. — М. Мир, 1973. — 425 с.
2. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике / Р.Бэкстер. — М.: Мир, 1985. — 488 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. 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.
5. Sachdev S. Quantum phase transitions / S.Sachdev. — New Haven, USA, Yale University, 1999. — 488 p.
6. Стишов С.М. Квантовые фазовые переходы / С.М.Стишов // УФН. — 2004. — Т. 174. — №8. С. 853-860.
7. 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.
8. 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)
 - 9 Паташинский А.З. Флуктуационная теория фазовых переходов. / А.З.Паташинский, В.Л.Покровский. — М., Наука, 1982. — 382 с.
 - 10 Васильев А.Н. Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике / А.Н.Васильев. — ПИЯФ РАН, СПб., 1998. — 774 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 Udodov V.N. The epsilon expansion near absolute zero /V.N.Udodov // Journal of Physics: Conference Series. — 2020. — **1679** 042061.
 - 13 Удодов В.Н. Новая модельная классификация равновесных фазовых переходов / В.Н.Удодов // Южно-сибирский научный вестник. — 2019. — №1(25). — С. 131-136.
 - 14 Удодов В.Н. Сферическая модель и квантовые фазовые переходы / В.Н.Удодов // Моделирование неравновесных, адаптивных и управляемых систем: Материалы XXIV Всероссийского семинара / Под ред. М.Г. Садовского; отв. за вып. М.Ю. Сенашова; — Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН, 2021. — С. 96-104.
 - 15 Удодов В.Н. Spherical model and quantum phase transitions / V.N.Udodov // J. Phys.: Conf. Ser. — 2021. — V. 2094. — P. 022027. doi:10.1088/1742-6596/2094/2/022027

**МОРФОЛОГИЧЕСКАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ
ЛИНИИ РОСТА ДЕНДРИТА В ПЕРЕОХЛАЖДЕННОМ РАСПЛАВЕ
ЧИСТОГО ВЕЩЕСТВА**

Шабловский О.Н., Кроль Д.Г.

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

Введение. 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 [1-6]. 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. Предвестниками неустойчивости макроскопических форм поверхности роста служат изломы, изгибы, складки, генерирующие возмущение кривизны исходной поверхности.

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

Уравнение роста и его решения. 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 N справа налево ($N = N\mathbf{n}$, $N < 0$), 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.

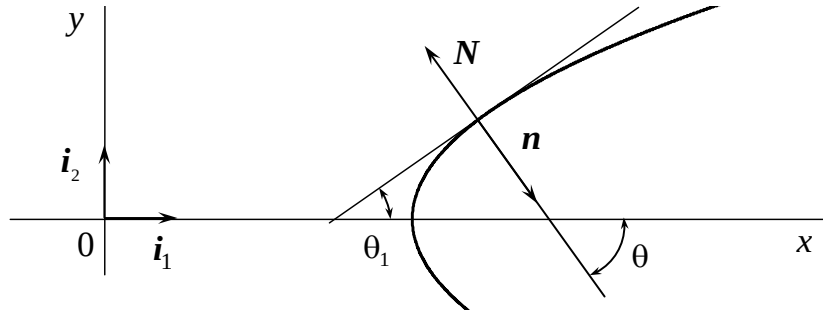


Рис. 1. Угол θ_1 заострения линии роста

Теплофизические свойства расплава и кристалла берем постоянными. Это допущение оправдано тем, что относится к уже сформировавшемуся сильному разрыву.

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

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

Приняты обозначения: L – теплота фазового перехода единицы объема вещества; μ – кинетический коэффициент роста; T_e – температура равновесия между твердой и жидкой фазами; T_c – равновесная температура кристаллизации; U – поверхностная энергия границы раздела фаз; B – переохлаждение на вершине дендрита; ΔT – переохлаждение расплава; c – объемная теплоемкость; λ – коэффициент теплопроводности.

Дифференциальное уравнение, описывающее малое возмущение стационарного контура линии роста, имеет вид

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

$$B_1 = 2\varphi A_1 A_2 < 0, \quad B_2 = (1 + A_2^2)\varphi > 0, \quad \alpha = L / (UT_c), \quad \varphi = \alpha / \mu,$$

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

Линеаризация уравнения (1) была выполнена на следующем точном решении:

$$F(y,t) = F^0(y,t) + f(y,t), \quad F^0 = A_1 t + A_2 y.$$

В ходе дальнейшего анализа нам понадобится параметр роста

$$\Phi = \frac{\mu T_c U}{N_m L}, \quad N_m = -N > 0, \quad (4)$$

который имеет размерность длины и несет информацию о кинетических свойствах ФГК. Выражение (4) есть произведение безразмерной скорости $\mu T_c / N_m$ на дробь U/L , характеризующую теплофизические свойства расплава. В книге [8] была изучена корреляция $\Delta T \leftrightarrow N_m$ для глубоко переохлажденных расплавов никеля, меди и германия. В работе [9] дана библиография наших работ, в которых представлен способ теплофизического истолкования связи $\Delta T \leftrightarrow N_m$ и получены полуэмпирические зависимости кинетического коэффициента $\mu = \mu(\Delta T)$ от переохлаждения расплава. Эти сведения позволяют определить параметр роста (4) и дать количественную оценку свойств возмущенной линии роста.

В данной работе нами проведены три серии расчетов. Началу расчетов предшествует вычисление зависимостей $\Phi = \Phi(\Delta T)$, $N_m = N_m(\Delta T)$ и построение соответствующих аппроксимирующих функций.

Числовые расчеты выполнены для меди. Входные параметры: $\Delta T = 180 \text{ К}$, $|N| = 11,0 \text{ м/с}$, $T_c = 1357 \text{ К}$, $L = 1,77 \cdot 10^9 \text{ Дж/м}^3$, $c = 4,17 \cdot 10^6 \text{ Дж/(м}^3 \cdot \text{К)}$, $\lambda = 317 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$, $U = 1,35 \text{ Дж/м}^2$, $\mu = 10,056 \text{ м/(К} \cdot \text{с)}$. Масштабы величин: $y_b = 10^{-6} \text{ м}$, $t_b = 10^{-7} \text{ с}$. Расчеты проведены в безразмерных переменных.

Расчет-1. Берем за основу решение

$$f(y,t) = H \exp(ky) \sin(k_1 y + rt) \quad (5)$$

$$2k = B_1 - (B_1^2 + 4k_1^2)^{1/2} < 0, \quad r = -k_1(B_1^2 + 4k_1^2)^{1/2} / B_2 < 0.$$

$$f_0(y) = f_1 \exp(ky), \quad k < 0, \quad y \geq 0. \quad (6)$$

Здесь $f_0(y)$ представляет неоднородный по y фон перед устойчивой волной, которая движется вверх, от вершины на периферию дендрита. Скорость волны

равна

$$\frac{U}{N_m} = 2 \left(2 \frac{y_*}{y_1} - 1 \right) \cos \theta_1, \quad 0 < y_1 < y_*, \quad (7)$$

$$y_* = \frac{\Phi}{2} \sin \theta_1 \operatorname{tg} \theta_1, \quad 0 < \theta_1 < \frac{\pi}{2},$$

где $y_* = 1/(-k_*)$ – критический размер зоны неоднородности фона, $k_* = B_1$. В том случае, когда $k > B_1$ решение неустойчивое и дает состояние, предшествующее началу бокового ветвления дендрита.

Порядок расчетов: задаем угол заострения θ_1 ; зная $\Phi = \Phi(\Delta T)$, вычисляем $y_* = y_*(\Delta T)$; после этого подсчитываем безразмерную скорость волны V/N_m и ее размерное числовое значение

$$V(\Delta T) = 2 \left(2 \frac{y_*}{y_1} - 1 \right) N_m(\Delta T).$$

Вычисления проводятся для нескольких фиксированных углов θ_1 .

Расчет-2. Уравнению (2) удовлетворяет решение

$$f(y, t) = H \cos ky \exp \left[h_2 y + t \left(h_1 - \frac{k^2}{B_2} \right) \right], \quad y \geq 0, \quad t \geq 0, \quad (8)$$

$$h_1 = -B_1^2/(4B_2) < 0, \quad h_2 = B_1/2 < 0.$$

$$f_0(y) = H \cos ky. \quad (9)$$

Здесь $f_0(y)$ представляет периодический по y фон. Скорость волны отрицательная: имеем движение фронта волны с периферии дендрита к его вершине:

$$\frac{V}{N} = \Phi^2 k^2 \sin^3 \theta_1 \operatorname{tg} \theta_1 + \cos \theta_1. \quad (10)$$

Возмущение (9) затухает экспоненциально: $f \sim \exp(-n_1 t)$,

$$v_1 = \frac{n_1}{(N_m/y_1)} = \frac{1}{S} \left[(1-S) \frac{y_1}{\Phi} + \pi^2 S^2 \frac{\Phi}{y_1} \right], \quad (11)$$

$$S = \sin^2 \theta_1, \quad y_1 = \frac{\pi}{k}, \quad \theta_1 \in \left(0, \frac{\pi}{2} \right).$$

В данном случае y_1 – ширина зоны неоднородности возмущения (10). Порядок

расчетов: задаем θ_1 ; выбираем числовое значение k ; находим безразмерные зависимости V/N и v_1 от ΔT , а также соответствующие им размерные функции $V(\Delta T)$ и $n_1(\Delta T)$. Выполняем варьирование значений θ_1 и k .

Расчет-3. Берем за основу решение

$$f(y, t) = H \exp(-ky) \exp \left[\left(h_1 + \frac{k^2}{B_2} \right) t + h_2 y \right], \quad y \geq 0, \quad t \geq 0, \quad (12)$$

$$f_0(y) = H \exp(-ky), \quad k > 0, \quad y \geq 0. \quad (13)$$

Неоднородность фона (13) аналогична (6). Волна движется с отрицательной скоростью

$$\frac{V}{N} = \left(1 - \frac{y_{**}^2}{y_1^2} \right) \cos \theta_1, \quad (14)$$

$$y_{**} = \Phi \sin \theta_1 \operatorname{tg} \theta_1, \quad \theta_1 \in \left(0, \frac{\pi}{2} \right). \quad (15)$$

Коэффициент затухания во времени равен

$$v_2 = \frac{n_2}{(N_m/y_1)} = \frac{1}{S} \left[(1-S) \frac{y_1}{\Phi} - S^2 \frac{\Phi}{y_1} \right], \quad (16)$$

$$S = \sin^2 \theta_1, \quad y_1 = 1/k.$$

Порядок расчетов такой же, как в предыдущем варианте (8)–(10).

Результаты расчетов.

Расчет-1. Скорость волны, бегущей от вершины по аperiодическому фону, в значительной степени зависит от параметра y_1 неоднородности фона. Например, при увеличении y_1 в два раза, скорость волны уменьшается еще сильнее – более чем в два раза. Скорость волны, отнесенная к скорости ФГК V/N_m , ведет себя немонотонно (имеет минимум) при росте ΔT . Вместе с тем размерная скорость волны $V = V(\Delta T)$ – близкая к линейной возрастающая функция переохлаждения.

Расчет-2. Движение волны, бегущей с периферии к вершине по периодическому фону, анализируем для низкочастотного $[k < (1/\Phi_2)]$ и высокочастотного $[k > (1/\Phi_1)]$ вариантов. Здесь Φ_1 и Φ_2 – левая и правая границы

интервала $\Phi \in [\Phi_1, \Phi_2]$, соответствующего изучаемому интервалу переохлаждений. Скорость волны реагирует ощутимым образом на рост y_1 только при достаточно большом $[\theta_1 > (\pi/4)]$ затуплении линии роста. Вместе с тем при $y_1 = 10^{-6}$ м скорость V_m ведет себя немонотонно по отношению к θ_1 (есть минимум), а при $y_1 = 2.5 \cdot 10^{-6}$ м эта зависимость монотонно убывающая. Нетривиальное поведение параметра затухания наблюдается при переходе «игла – квазиплоская ФГК»: безразмерная величина $v_1(\Delta T)$ имеет максимум при не слишком большом затуплении; на квазиплоской ФГК – минимум. Размерный коэффициент затухания – близкая к линейной возрастающая функция $n_1 = n_1(\Delta T)$ и при этом возмущение затухает быстрее всего на «игле». Типичный пример, иллюстрирующий свойства параметра затухания, представлен на рисунке 2.

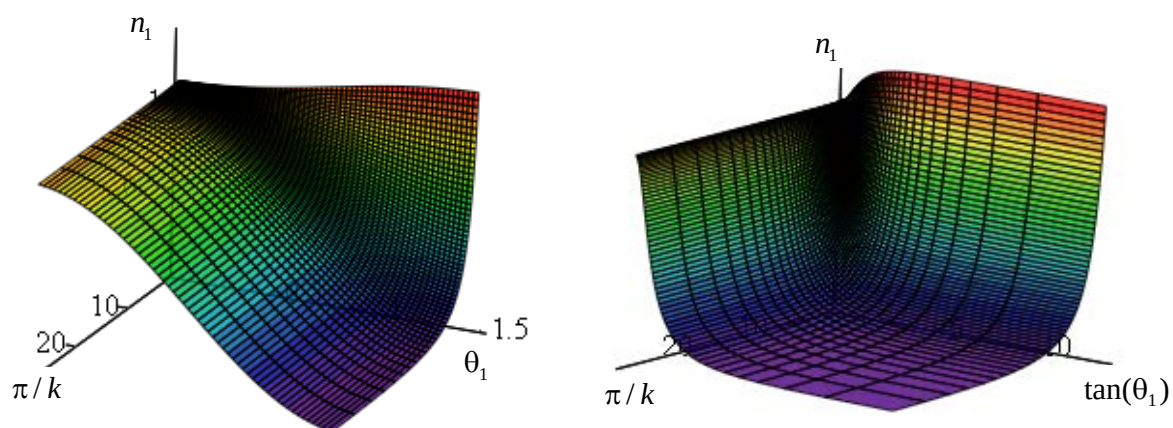


Рис. 2. Зависимость параметра затухания от ширины зоны неоднородности и от угла заострения линии роста

Расчет-3. Главное отличие от процессов, относящихся к расчету-1 в том, что здесь волна движется с периферии к вершине; фон перед волной – аperiодический. В данном случае линия, определяющая зависимость относительной скорости V/N от ΔT обращена выпуклостью вверх. В левой части рисунка 3 показан пространственно-временной портрет линии роста на периодическом фоне; в правой части рисунка 3 изображен пример складки на линии роста дендрита.

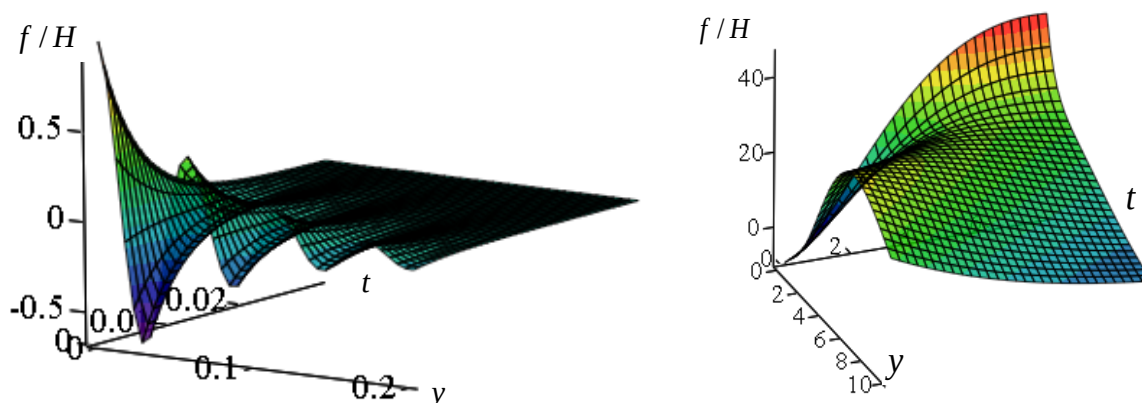


Рис. 3. Пространственно-временной портрет линии роста

Заключение. Обнаружено, что устойчивость / неустойчивость волнового возмущения определяется направлением движения фронта волны (скорость $V > 0$ - движение от вершины на периферию; $V < 0$ - движение с периферии к вершине), а также пространственно-временными корреляциями между фоном $f_0(y)$ перед волной и состоянием $f(y,t)$ линии роста за фронтом волны. Корреляция «апериодический фон вида $f_0 \sim \exp(ky)$, $k < 0$, $y \geq 0$ » - «периодический по t режим за волной, $V > 0$ » демонстрирует существование порогового значения параметра неоднородности $k = k_*$: процесс устойчив при $k < k_*$, а при $0 > k > k_*$ формируется боковая ветвь.

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. Strickland, J. On Directional Dendritic Growth and Primary Spacing – A Review / J. Strickland, B. Nenchew // *Crystals*. – 2020. – 10(7). – P. 627.
7. Шабловский, О.Н. Морфологические свойства линии роста двумерного дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский // *Прикладная физика*. – 2012. – №4. – С. 40–46.
8. Herlach, D.M. Metastable Solids from Undercooled Melts / D.M. Herlach, P. Galenko, D. Holland-Moritz –Oxford: Pergamon, 2007. – 448 p.
9. Шабловский О.Н. Динамика неустойчивости волновых возмущений и боковое ветвление дендрита в переохлажденном расплаве / О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль // *Успехи прикладной физики*. – 2022. – №2. – С. 189-202.

СПИСОК ДОКЛАДОВ

С.С. Анцыферов, В.Г. Маслов, К.Н. Фазилова КОГНИТИВНЫЙ ПОДХОД К УПРАВЛЕНИЮ СИСТЕМАМИ КАЛИБРОВКИ ЭТАЛОННЫХ МЕР НАНОМЕТРИИ	3
С.И. Барцев ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НЕГЕНОМНОЙ ВАРИАБЕЛЬНОСТИ КЛЕТОК ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ БАКТЕРИЙ	9
С.И. Барцев, А.Г. Дегерменджи ЗАВИСИМОСТЬ УСТОЙЧИВОСТИ ЭКОСИСТЕМЫ ОТ СТЕПЕНИ ЕЕ ЗАМКНУТОСТИ	19
С.И.Барцев, А.Б.Сарангова ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАПУСКА БИОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В НАКОПИТЕЛЬНОЙ КУЛЬТУРЕ <i>Photobacterium phosphoreum</i> 1889	28
С. Botella, N.P. Kuzenkov ANTHROPOMETRIC DIFFERENCES BETWEEN SIBERIAN INDIVIDUALS USING STATISTICS	35
Т. Б. Витова, Е. С. Кирик ВЛИЯНИЕ СКОРОСТИ СВОБОДНОГО ДВИЖЕНИЯ НА РАСТЕКАНИЕ ЛЮДСКОГО ПОТОКА В ДЛИННОМ КОРИДОРЕ	42
Ю.Я. Гафнер, Д.А. Рыжкова ТЕРМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА ИЗ ГАЗОВОЙ СРЕДЫ НАНОЧАСТИЦ Cu-Au	50
С.Л. Гафнер, Д.А. Рыжкова, Ю.Я. Гафнер	

ОЦЕНКА ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА НАНОКЛАСТЕРОВ Cu-Au ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ СИНТЕЗА ИЗ ГАЗОВОЙ СРЕДЫ	57
Ю.Я. Гафнер, Д.А. Рыжкова, С.Л. Гафнер РОЛЬ АТОМОВ ЗОЛОТА ПРИ ФОРМИРОВАНИИ МОРФОЛОГИИ НАНОКЛАСТЕРОВ Cu-Au В СЛУЧАЕ ГАЗОФАЗНОГО СИНТЕЗА	65
Р.Н. Голых, С.Н. Цыганок, В.Н. Хмелёв, А.Р. Барсуков, В.А. Шакура ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ МЕХАНИЗМА УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ДЕГАЗАЦИИ ЖИДКОСТИ ЗА СЧЁТ СБЛИЖЕНИЯ ПУЗЫРЬКОВ	74
Р.Н. Голых, В.Н. Хмелёв, А.В. Шалунов, А.Р. Барсуков, В.А. Шакура, И.А. Маняхин, Д.А. Ильченко ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРУШЕНИЯ МОНОМЕРНЫХ ЦЕПЕЙ В РЕЗУЛЬТАТЕ СОУДАРЕНИЯ, ИНИЦИИРОВАННОГО УЛЬТРАЗВУКОВОЙ КАВИТАЦИЕЙ	81
М. Г. Доррер, С.Е. Головенкин СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ БАЛАНСИРОВКИ ОБУЧАЮЩИХ ВЫБОРОК ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ ИСКУССТВЕННОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ, ПРОГНОЗИРУЮЩЕЙ ОСЛОЖНЕНИЯ И ИСХОДЫ ИНФАРКТА МИОКАРДА	90
Каганович Б.М, Зароднюк М.С., Барахтенко Е.А. РАВНОВЕСНОЕ ТЕРМОДИНАМИКО-ЦЕПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ	110
Н.И. Косарев МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХ–СТУПЕНЧАТОЙ ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМОВ БАРИЯ ЧЕРЕЗ ВОЗБУЖДЕННОЕ $^3P_1$ СОСТОЯНИЕ	116

Н.И. Косарев	
ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТРЕХЧАСТИЧНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ УЛЬТРАХОЛОДНОЙ БАРИЕВОЙ ПЛАЗМЫ	125
Н.П. Кузенков	
ЗАВИСИМОСТЬ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОЖИДАНИЯ ПОРЯДКОВЫХ СТАТИСТИК ОТ ОБЪЁМА ВЫБОРКИ НА ПРИМЕРЕ РАЗМАХА	134
А.Н. Мацулев, А.Г. Зотин, К.В. Симонов, А.А. Кабанов	
АЛГОРИТМЫ ВЫЯВЛЕНИЕ СКРЫТЫХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ В ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫХ РЯДАХ ДАННЫХ ГЕОМОНИТОРИНГА	142
Д.В. Спирин, В.Н. Удодов, Р.А. Козлитин	
ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ КИНЕТИЧЕСКОГО ИНДЕКСА В МОДЕЛИ КВАЗИОДНОМЕРНОГО ИЗИНГОВСКОГО АНТИФЕРРОНАНОМАГНЕТИКА С ФИКСИРОВАННЫМИ ПРИМЕСЯМИ	148
В.Н. Удодов	
ТЕОРИЯ ТУРБУЛЕНТНОСТИ ЛАНДАУ КАК ТЕОРИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ	155
В.Н. Удодов	
НОВЫЕ СООТНОШЕНИЯ МЕЖДУ КРИТИЧЕСКИМИ ИНДЕКСАМИ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ	166
Шабловский О.Н., Кроль Д.Г.	
МОРФОЛОГИЧЕСКАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ЛИНИИ РОСТА ДЕНДРИТА В ПЕРЕОХЛАЖДЕННОМ РАСПЛАВЕ ЧИСТОГО ВЕЩЕСТВА	173

АЛФАВИТНЫЙ СПИСОК УЧАСТНИКОВ СЕМИНАРА

Участник	Адрес	Стр.
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	110
Барсуков Александр Романович	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: alex_bars@u-sonic.ru	74, 81
Барцев Сергей Игоревич	660036, Красноярск, ул. Академгородок, строение 50, Институт биофизики СО РАН E-mail: bartsev@yandex.ru	9, 19, 28
Botella Clement	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: clement.botella01@orange.fr	35
Витова Татьяна Брониславовна	660036, Россия, г. Красноярск, Академгородок, д. 50, стр. 44, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: vitova@icm.krasn.ru	42

Гафнер Светлана Леонидовна	655017, г. Абакан, г.Абакан, ул.Ленина, д. 92 Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова E-mail: sgafner@rambler.ru	57, 65
Гафнер Юрий Яковлевич	655017, г. Абакан, г.Абакан, ул.Ленина, д. 92 Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова E-mail: ygafner@khsu.ru	50, 57, 65
Головенкин Сергей Евгеньевич	660022, Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1, Красноярский государственный медицинский университет. Имени профессора В.Ф.Войно- Ясенецкого E-mail: gse2008@mail.ru	90
Голых Роман Николаевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: romangl90@gmail.com	74, 81
Дигерменджи Андрей Георгиевич	660036, Красноярск, ул. Академгородок, строение 50, Институт биофизики СО РАН E-mail: ibp@ibp.ru	19
Доррер Михаил Георгиевич	660000, Красноярск, просп. имени газеты Красноярский Рабочий, 31, Сибирский государственный университет науки и технологий им. М.Ф. Решетнева E-mail: dorrer_mg@sibsau.ru	90
Зароднюк Максим Сергеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: max@isem.irk.ru	110

Зотин Александр Геннадьевич	660037, г. Красноярск, пр-т имени газеты Красноярский рабочий, 31а, Сибирский госуниверситет науки и технологий им. ак. М.Ф. Решетнева E-mail: zotin.sibsau@gmail.com	142
Ильченко Дмитрий Александрович	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: ilchenko.dmitrij.01@mail.ru	81
Кабанов Алексей Анатольевич	660049, г. Красноярск, пр-т Мира, 53, НП «ЭЦ Рационального освоения природных ресурсов» E-mail: weller86@inbox.ru	142
Каганович Борис Моисеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: thermo@isem.irk.ru	110
Кирик Екатерина Сергеевна	660036, Россия, г. Красноярск, Академгородок, д. 50, стр. 44, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: kirik@icm.krasn.ru	42
Козлитн Роман Анатольевич	655017, Абакан, пр. Ленина, д. 92/1, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ), E-mail: roman@khsu.ru	148
Косарев Николай Иванович	660025, г. Красноярск, СФУ, Институт цветных металлов и материаловедения E-mail: kosarev_nikolai@mail.ru	116, 125

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	173
Кузенков Николай Петрович	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: knp@vivaldi.net	35
Маняхин Иван Александрович	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: manyaxin.ivan@bk.ru	81
Маслов Виктор Геннадьевич	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
Мацулев Александр Николаевич	660036, Россия, г. Красноярск, Академгородок, д. 50, стр. 44, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: matsulev@mail.ru	142
Рыжкова Дарья Антоновна	655017, г. Абакан, г.Абакан, ул.Ленина, д. 92 Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова E-mail: bashkova.daria@yandex.ru	50, 57, 65
Сарангова Антонина Борисовна	660041, Красноярск, Свободный пр., 82А, Сибирский федеральный университет E-mail: sarangova.antonina@yandex.ru	28

Симонов Константин Васильевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН, т. 89135954902 E-mail: simonovkv@icm.krasn.ru	142
Спирин Дмитрий Владимирович	655000, Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, Инженерно-технологический институт E-mail: dvspirin@mail.ru	148
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	53, 96, 116, 148
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
Хмелёв Владимир Николаевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: vnh@u-sonic.ru	74, 81
Цыганок Сергей Николаевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: grey@bti.secna.ru	74
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	173

Шакура Владислав Анатольевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: shakura.va@u-sonic.ru	74, 81
Шалунов Андрей Викторович	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: shakura.va@u-sonic.ru	81

Научное издание

**Моделирование неравновесных адаптивных и управляемых систем–
2022**

Материалы XXV Всероссийского семинара 7 – 9 октября 2022 г.

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

Подписано в печать «6» сентября 2022 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>